

**НАСТАВНО–НАУЧНОМ ВЕЋУ
ФИЗИЧКОГ ФАКУЛТЕТА УНИВЕРЗИТЕТА У БЕОГРАДУ**

Пошто смо на VIII седници Наставно–научног већа Физичког факултета Универзитета у Београду одржаној 24.06.2026. одређени за чланове Комисије за припрему извештаја о докторској тези "Energy Landscapes, Crystal Structure Prediction, and Modeling of Rare Earth Ternary Compounds" (наслов на српском језику "Енергетски пејзажи, предвиђање кристалних структура и моделовање тернарних једињења елемената ретких земаља"), из научне области Физика кондензоване материје и статистичка физика, коју је дипломирани физичар Милан Пејић предао Физичком факултету у Београду дана 22.06.2026, подносимо следећи

Р Е Ф Е Р А Т

1. ОСНОВНИ ПОДАЦИ О КАНДИДАТУ

1.1. Биографски подаци

Милан Пејић је рођен 4. новембра 1980. године у Александровцу. Након завршене основне школе у Александровцу, школовање је наставио у специјализованом математичком одељењу Гимназије у Крушевцу. Дипломирао је 2009. године на Физичком факултету Универзитета у Београду, на смеру Теоријска и експериментална физика, одбравивши дипломски рад "Рачунање електронске структуре молекула ДНК", који је израдио под руководством др Радомира Жикића.

Поред студија физике, 2011. године завршио је мастер академске студије на Економском факултету Универзитета у Београду, а поседује и вишегодишње радно искуство у анализи података, развоју софтвера, економском моделовању и администрацији рачунарских система у финансијском и ИТ сектору.

Докторске академске студије на Физичком факултету Универзитета у Београду, из научне области Физика кондензоване материје и статистичка физика, уписао је 2019. године. Од тада је и члан Лабораторије за теоријско истраживање материјала (*L-TIM*) и Центра за синтезу, процесирање и карактеризацију материјала за примену у екстремним условима (*CEXTREME-LAB*), центра изузетних вредности Института за нуклеарне науке "Винча". Од 2021. године запослен је у Институту за нуклеарне науке "Винча" у Београду, у Лабораторији за материјале, најпре као истраживач приправник, а од 2023. године као истраживач сарадник.

1.2. Научна активност

Научна активност Милана Пејића током докторских студија усредсређена је на проучавање енергетских пејзажа, предвиђање кристалних структура и испитивање електронских, магнетних, механичких и вибрационих својстава сложених кристалних система, са посебним нагласком на тернарна једињења елемената ретких земаља, која су и предмет истраживања ове дисертације. У овим истраживањима користи комбинацију

метода теорије функционала густине (*DFT*), глобалну оптимизацију, методе претраживања структурних прототипова у базама података и методе машинског учења. Значајан део његовог рада односи се и на развој специјализованог софтвера за анализу и селекцију структурних кандидата као и на примену машинског учења и неуронских мрежа у моделовању кристалних материјала.

Од 2014. до 2017. године учествовао је на *SCOPES* пројекту Института за физику у Београду, Института за нуклеарне науке "Винча" и *Ecole Polytechnique Federale de Lausanne (EPFL)* "*Growth, Characterization and Modeling of Magnetic Nanostructures at Surfaces*".

У оквиру програма *Horizon 2020*, 2020. године одобрен му је пројекат под називом "*Energy Landscapes of Rare-Earth Compounds Containing Several Different Anions*" у оквиру *HPC-Europa3* програма (пун назив: *Transnational Access Programme for a Pan-European Network of HPC Research Infrastructures and Laboratories for scientific computing, Programme: H2020, Call: INFRAIA-2016-1, Type of Action: RIA, Grant Agreement Number: 730897*) за сарадњу са High Performance Computing Center (HLRS) у Штутгарту, Немачка.

Радећи под руководством др Дејана Загорца, научног саветника Института за нуклеарне науке "Винча", Милан Пејић је као аутор и коаутор објавио петнаест научних радова у водећим међународним научним часописима, један рад у осталим међународним научним часописима, седам радова у домаћим научним часописима, а учествовао је и на већем броју међународних научних скупова и конференција, на којима је презентовао своје научне резултате. Као предавач по позиву је учествовао на међународној конференцији "*Energy Landscapes 2024 Lovran*", од 25. до 30. августа у Ловрану, Република Хрватска. Радови у међународним часописима у којима је Милан Пејић аутор или коаутор цитирани су укупно 123 пута (према бази Scopus на дан 29.06.2026.)

2. ОПИС ПРЕДАТОГ РАДА

2.1. Основни подаци

Докторска теза "*Energy Landscapes, Crystal Structure Prediction, and Modeling of Rare Earth Ternary Compounds*" (наслов на српском језику "Енергетски пејзажи, предвиђање кристалних структура и моделовање тернарних једињења елемената ретких земаља") израђена је под руководством др Дејана Загорца, научног саветника Института за нуклеарне науке "Винча" Универзитета у Београду. Ментор испуњава услове Физичког факултета и Универзитета у Београду за руковођење израдом докторске дисертације: у научном је звању и аутор је 69 радова из области физике и хемије кондензоване материје, кристалографије, рачунарског моделовања и науке о материјалима, који су објављени у водећим међународним часописима и представљени на бројним међународним конференцијама. Радови др Дејана Загорца цитирани су укупно 1723 пута, а његов *h*-индекс износи 21 (према бази Scopus на дан 29.06.2026.)

Теза је написана на енглеском језику. У приложеном облику има 196 страна (не рачунајући насловне стране, стране са сажецима на енглеском и српском језику, захвалницу, садржај и биографију). Теза је подељена у девет поглавља, а осам додатака допуњују главни текст детаљима о коришћеним теоријским и нумеричким техникама, додатним структурним подацима и резултатима прорачуна. Теза садржи 129 слика и 36 табела и позива се на укупно 208 референци.

2.2. Предмет и циљ рада

Предмет докторске тезе Милана Пејића је теоријско истраживање енергетских пејзажа, предвиђање кристалних структура и испитивање термодинамичке стабилности, електронских, магнетних и вибрационих својстава тернарних једињења елемената ретких земаља са више различитих анјона. Истраживање је усредсређено на пет одабраних кристалних система: лантан-оксијодид (LaOI), церијум-оксинитрид ($\text{Ce}_3\text{O}_3\text{N}$), скандијум-оксихлорид (ScOCl), холмијум-флуороселенид (HoFSe) и лантан-флуоросулфид (LaFS).

Истраживање је мотивисано значајем једињења елемената ретких земаља у физици и хемији кондензоване материје, кристалографији, науци о материјалима, као и у њиховој широкој технолошкој примени. Једињења ових елемената показују разноврсна функционална својства и налазе примену у областима електронике, оптике, магнетних материјала, катализе, енергетике и напредних керамика. Посебно су значајни системи који садрже више различитих анјона, јер разлике у наелектрисању, величини, електронегативности и поларизабилности анјона могу довести до стабилизације нових координационих окружења, формирања нових кристалних структура и "финог подешавања" (енг. *fine tuning*) електронских, оптичких и транспортних својстава.

Полазиште рада је чињеница да се кристални системи могу описати коришћењем енергетских пејзажа, чији локални минимуми одговарају стабилним или метастабилним структурним модификацијама. Пошто је експериментално одређивање могућих фаза, фазних прелаза и својстава сложених тернарних једињења често веома захтевно, теоријско предвиђање структура и њихових својстава представља важан пут ка разумевању и усмеравању будућих експерименталних истраживања.

Савремена истраживања у физици кондензоване материје у све већој мери ослањају се на рачунарске прорачуне на компјутерским кластерима високих перформанси (*HPC clusters*) и обраду великих скупова података. Методе теорије функционала густине омогућавају поуздану локалну оптимизацију кристалних структура и израчунавање електронских, магнетних, механичких, вибрационих и других својстава, док Монте Карло и друге стохастичке методе омогућавају опсежно претраживање сложених енергетских пејзажа. Због често великог броја генерисаних резултата, посебан значај имају и аутоматизована анализа, класификација и селекција података. У истом контексту, методе вештачке интелигенције и машинског учења постају важан део савремених симулација и моделовања материјала, што је додатно потврђено доделом Нобелове награде за физику 2024. године Џону Ц. Хопфилду и Џефрију Хинтону за доприносе развоју метода машинског учења заснованих на вештачким неуронским мрежама.

Циљ докторске тезе Милана Пејића био је да се, коришћењем метода опсежног истраживања енергетских пејзажа, генерише скуп могућих модификација изабраних једињења елемената ретких земаља, како би се након структурне анализе, *ab initio* прорачуна, коришћења метода машинског учења и идентификације стабилних и метастабилних модификација, предвидела њихова електронска, вибрациона и магнетна својства и боље разумела веза између њихове структуре и физичких својстава. Посебан циљ био је да се за изабране структурне кандидате испита релативна стабилност, могући фазни прелази у зависности од притиска, електронска зонска структура (енг. *band structure*), као и да се, где је то релевантно, истражи њихово магнетно уређење, израчунају фононске дисперзије и испита динамичка стабилност.

У методолошком делу тезе примењен је хијерархијски приступ у којем се најпре генеришу велики скупови структурних кандидата применом глобалне оптимизације и *Data Mining* методе, односно претраживања структурних прототипова у кристалографским базама података. Након тога су кандидати класификовани према симетрији и структурном типу, рангирани по енергији и одабрани за локалну оптимизацију на нивоу теорије функционала густине (*DFT*). За релевантне структуре су затим израчунате једначине стања, зависности енталпије од притиска, електронске зонске структуре и густине стања (енг. *density of states*), док су за системе са магнетним својствима коришћени спин-поларизовани *DFT+U* прорачуни ради одређивања магнетног уређења.

Поред примене постојећих метода, у тези су **развијена и два методолошка доприноса** истраживању енергетских пејзажа. Софтверски пакет STyX (*Structure Type Explorer*) развијен је за обраду великих скупова структурних кандидата, издвајање информација о симетрији и структурном типу, идеализацију структура, уклањање дупликата и избор представника структурних типова за локалну оптимизацију коришћењем *DFT* прорачуна. Други методолошки допринос је развој AI-ELX (*Artificial Intelligence Energy Landscape Explorer*) модела за предвиђање енергије основног стања и оптимизацију структура, заснованог на неуронским мрежама и тренираног на резултатима *DFT* прорачуна, који је примењен на LaFS кристални систем ради навођења претраге енергетског пејзажа на област екстремних притисака.

Применом ових приступа показано је да опсежно истраживање енергетских пејзажа може да репродукује познате структуре основног стања и да предвиди нове кристалне модификације. За LaOI је потврђено да позната α -фаза представља модификацију основног стања и предвиђено је шест додатних нискоенергетских модификација. За $\text{Ce}_3\text{O}_3\text{N}$ је идентификована структура добијена претраживањем база података као кандидат за глобални минимум, а спин-поларизовани *DFT+U* прорачуни показују да је реч о антиферромагнетном полупроводнику. За ScOCl је репродукована позната α -фаза основног стања и предвиђен је фазни прелаз под притиском у β -ScOCl фазу, при чему су обе фазе индиректни полупроводници. За HoFSe систем су репродуковане три експериментално познате модификације и идентификовано је седамнаест додатних модификација, укључујући две фазе које постају стабилне у области високих притисака, док су *DFT+U* прорачуни показали да је основно стање антиферромагнетно и полупроводно. За LaFS је потврђена позната фаза структурног типа *PbClF*, предвиђен је прелаз под притиском у фазу структурног типа *TiNiSi* и показано је да су све испитане модификације полупроводници. Применом AI-ELX модела идентификована су и два додатна структурна кандидата, од којих један постаје термодинамички стабилан, док други остаје метастабилан у области екстремних притисака.

Докторска теза показује да комбиновање широке претраге енергетских пејзажа, аутоматизоване структурне анализе, *DFT* прорачуна својстава и метода машинског учења представља конзистентан и широко применљив оквир за проучавање сложених кристалних система. Добијени резултати доприносе разумевању полиморфизма, стабилности и везе између кристалне структуре и функционалних својстава тернарних система елемената ретких земаља, као и навођењу будућих експерименталних истраживања ка најрелевантнијим структурним кандидатима са жељеним физичким својствима.

2.3. Публикације

Резултати представљени у докторској тези Милана Пејића су објављени у четири рада у водећим међународним часописима.

[A4] D. Zagorac, J. Zagorac, M. Fonović, M. Pejić, and J. C. Schön,
Computational discovery of new modifications in scandium oxychloride (ScOCl) using a multi-methodological approach,
Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie 648(23), e202200198 (2022).
DOI: 10.1002/zaac.202200198
ISSN 0044-2313, Категорија M23, ИФ2022 = 1,4

[A5] M. Pejić, D. Zagorac, J. Zagorac, B. Matović, and J. C. Schön,
Structure prediction via global energy landscape exploration of the ternary rare-earth compound LaOI,
Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie 648(24), e202200308 (2022).
DOI: 10.1002/zaac.202200308
ISSN 0044-2313, Категорија M23, ИФ2022 = 1,4

[A7] J. Zagorac, J. C. Schön, B. Matović, M. Pejić, M. Prekajski Đorđević, and D. Zagorac,
Computational discovery of new feasible crystal structures in Ce₃O₃N,
Crystals 13(5), 774 (2023).
DOI: 10.3390/cryst13050774
ISSN 2073-4352, Категорија M21, ИФ2023 = 2,4

[A12] M. Pejić, D. D. Zimmermann, D. Zagorac, M. Fonović, J. Zagorac, J. C. Schön, and T. Schleid,
Structural exploration of holmium fluoride selenide (HoFSe): theory and experiment,
Journal of Physics and Chemistry of Solids 208, 113000 (2026).
DOI: 10.1016/j.jpms.2025.113000
ISSN 0022-3697; 1879-2553, Категорија M21, ИФ2024 = 4,9

Ови радови су до сада цитирани укупно 23 пута, односно 4 пута без аутоцитата и цитата коаутора (према бази *Scopus* на дан 29.06.2026.)

2.4. Преглед научних резултата изложених у тези

Докторска теза Милана Пејића састоји се од девет поглавља и осам додатака.

У **првом поглављу** изложена је мотивација за истраживање енергетских пејзажа и предвиђање кристалних структура тернарних једињења елемената ретких земаља са мешовитим анјонима. Дат је преглед основних особина елемената ретких земаља и њихових једињења, са посебним освртом на оксихалиде, оксинитриде и флуорохалкогениде. Објашњено је зашто комбинација различитих анјона може довести до појаве нових координационих окружења елемената ретких земаља, нових структурних типова и функционалних својстава. У овом поглављу су формулисани и главни циљеви тезе и описана је структура рада.

Друго поглавље поставља теоријску основу за истраживања представљена у тези. Уведени су појмови симетрије, просторних група, основних кристалографских појмова, структурних типова, прототипова и полиморфизма, као и основни појмови динамике решетке и фонона. Такође су изложене основе теорије функционала густине, разматрани

су концепти магнетизма релевантни за прорачуне из првих принципа, као и термодинамички опис једначина стања и фазних прелаза. Поглавље се завршава прегледом основних идеја машинског учења, вештачких неуронских мрежа и графовских неуронских мрежа, које су касније употребљене у развоју модела вештачке интелигенције.

Треће поглавље садржи методолошки део тезе. Најпре су описане постојеће методе истраживања енергетских пејзажа: глобална оптимизација, заснована на симулираном каљењу и Монте Карло претрази уз коришћење емпиријских потенцијала, *Data Mining* приступ заснован на претраживању структурних прототипова у кристалографским базама података, као и локална оптимизација одабраних кандидата применом *ab initio* метода. Након тога су представљена два нова методолошка доприноса тезе. Софтверски пакет *STuX* [B1] развијен је као алат за анализу, идеализацију и класификацију великог броја структурних кандидата, што укључује уклањање дупликата, груписање структура у структурне типове и избор репрезентативних релевантних структура за *DFT* прорачуне. Модел *AI-ELX* [B4], заснован на графовским неуронским мрежама и трениран на резултатима *DFT* прорачуна, развијен је за предвиђање енергија основног стања структура, релаксацију геометрије кристалних структура (димензија ћелије и положаја атома), као и навођење претраге енергетског пејзажа ка одабраним областима, посебно ка области високог притиска.

У четвртм поглављу приказано је истраживање енергетског пејзажа лантан-оксијодида (LaOI) [A5, B7]. Опсежна глобална претрага произвела је више од милион локалних минимума, који су затим груписани и ранжирани према енергији, симетрији и учесталости појављивања. Након локалне оптимизације на *ab initio* нивоу потврђено је да је експериментално позната тетрагонална α - LaOI фаза модификација основног стања, док је предвиђено још шест нискоенергетских метастабилних модификација, означених као β -, γ -, δ -, ϵ -, ζ - и η - LaOI . За одабране структуре израчунате су једначине стања и електронске структуре. Показано је да су све оптимизоване модификације полупроводници, да се горњи део валентне зоне углавном састоји од $I(p)$ и $O(p)$ стања, док се стања на дну проводне зоне првенствено састоје од $\text{La}(d)$ стања, уз мањи допринос $\text{La}(f)$ стања. Добијени резултати указују на значајну структурну флексибилност LaOI система и дају смернице за будуће експерименталне покушаје стабилизације метастабилних фаза, при чему израчунате вредности енергијског процепа (енг. *band gap*) показују широк распон међу модификацијама (од 2,33 до 4,17 eV коришћењем *PBE* функционала, односно од 3,14 до 5,26 eV коришћењем *HSE06* функционала), што указује на значајну зависност ширине енергијског процепа од структурне модификације.

Пето поглавље посвећено је церијум-оксинитриду ($\text{Ce}_3\text{O}_3\text{N}$), систему који је у тези разматран као теоријски предвиђено једињење [A7]. Показано је да је за овакав систем неопходно комбиновати глобалну оптимизацију и *Data Mining* приступ, јер је структура најниже енергије, означена као $\text{Ce}_3\text{O}_3\text{N-DMI}$, добијена релаксацијом структурног прототипа пронађеног претраживањем база података. Утврђено је да ова структура представља главни кандидат за глобални минимум и да остаје стабилна и под притиском, док друге структуре са ниском енергијом основног стања представљају метастабилне или кандидате стабилизоване под ефективним негативним притиском. Спин-поларизовани *DFT+U* прорачуни показали су да је енергетски најповољније магнетно уређење антиферомагнетно и да је $\text{Ce}_3\text{O}_3\text{N-DMI}$ фаза полупроводник са индиректним енергијским процепом.

У шестом поглављу истраживан је енергетски пејзаж скандијум-оксихлорида (ScOCl) [A4, D4] комбиновањем глобалне оптимизације и *Data Mining* методе, репродукована је

експериментално позната α -ScOCl фаза и идентификоване су три додатне нискоенергетске модификације: β -, γ - и δ -ScOCl. Термодинамичка анализа заснована на једначинама стања и зависности енталпије од притиска показала је да је α -фаза стабилна под амбијенталним условима. Предвиђен је фазни прелаз из α - у β -фазу на релативно ниским притисцима, док γ - и δ -фаза остају метастабилне структуре. Рачунање електронске структуре показало је да су α - и β -ScOCl индиректни полупроводници, са валентним зонама у којима доминирају Cl(p) и O(p) стања и проводном зоном претежно са Sc(d) стањима.

Седмо поглавље приказује истраживање холмијум-флуороселенида (HoFSe) [A12, B2, B5], у оквиру којег је опсежна претрага енергетског пејзажа, комбинована са претраживањем постојећих структурних прототипова, омогућила да се након *DFT* оптимизације издвоји двадесет најрелевантнијих полиморфних модификација са најнижим енергијама основног стања. Међу њима су пронађене три експериментално познате структуре, а осталих седамнаест структура одговара могућим модификацијама које су метастабилне или стабилне под различитим условима температуре и притиска. Термодинамичка анализа показала је да је *expl*-тип структура основног стања, док се под притиском фаворизују β - и *PbFCl*-тип структуре. *DFT* прорачуни магнетних својстава показали су да су антиферромагнетна уређења енергетски најповољнија, док неколинеарни прорачуни са укљученом спин-орбит интеракцијом указују на релативно плитак енергетски пејзаж око неколико локалних минимума, на ком слабо некомпензовано неколинеарно антиферромагнетно уређење представља стање са најнижом енергијом. Све испитиване магнетне конфигурације *expl*-HoFSe структурног типа су полупроводне, са енергијским процепом приближно исте ширине (око 1,6 eV), где максимумом валентне зоне доминирају Se(p) стања, док минимум проводне зоне чине локализована Ho $4f$ стања.

Осмо поглавље посвећено је лантан-флуоросулфиду (LaFS) [B4, B8], чија је глобална оптимизација спроведена за широк опсег величине ћелија и вредности притиска, а затим допуњена *Data Mining* приступом, генерисала скоро четири милиона структурних кандидата. Применом анализе симетрије, поређења структура, статистике учесталости појављивања структура на енергетском пејзажу и рангирања по енергији, овако велики скуп кандидата сведен је на број структура адекватан за *DFT* прорачуне. Потврђено је да је експериментално позната структура *PbFCl*-типа глобални минимум, а идентификовано је шеснаест додатних нискоенергетских модификација. Предвиђен је прелаз под притиском из структуре *PbFCl*-типа у *TiNiSi*-тип, док су у области ефективно негативних притисака најзначајније *J-LaFS* и *LiCuO*-тип модификације. Прорачуни електронске структуре показали су да су све испитиване LaFS модификације полупроводници, а прорачуни фононског спектра су потврдили динамичку стабилност основне *PbFCl* структуре и одабраних модификација (мета)стабилних под високим притиском. Применом *AI-ELX* модела неуронских мрежа, извршена је додатна претрага у области екстремних притисака, при чему су идентификована два нова структурна кандидата, α -LaFS у орторомбичној просторној групи *Pbcn* (бр. 60) и β -LaFS у тетрагоналној просторној групи *P4/nmm* (бр. 129), а који су релевантни структурни кандидати у тој области.

У деветом поглављу сумирани су главни резултати и методолошки доприноси тезе. Закључено је да комбинација опсежног истраживања енергетских пејзажа, кристалографске анализе, аутоматизоване обраде великих скупова структурних кандидата, *DFT* прорачуна и метода машинског учења омогућава систематично проналажење стабилних и метастабилних модификација тернарних једињења елемената ретких земаља. Посебно је истакнуто да *STyX* софтверски пакет и *AI-ELX* модел

неуронских мрежа, проширују стандардну методологију истраживања енергетских пејзажа и применљиви су и на друге сложене кристалне системе.

Додаци садрже техничке и додатне резултате који подржавају главни текст тезе. У **додатку А1** дат је списак скраћеница коришћених у тези, у **додатку А2** сажетак класификације просторних група. **Додатак А3** садржи додатне информације о методама истраживања енергетских пејзажа, док **додаци А4-А8** садрже додатне информације и резултате прорачуна, које укључују додатне електронске зонске структуре, структурне податке и друге додатне информације везане за LaOI, Ce₃O₃N, ScOCl, HoFSe и LaFS кристалне системе чији су резултати представљени од четвртог до осмог поглавља.

3. СПИСАК ПУБЛИКАЦИЈА КАНДИДАТА

А. Радови у међународним часописима

Радови у водећим међународним часописима (ИФ>1)

[A1] T. Škundrić, D. Zagorac, J. C. Schön, M. Pejić, and B. Matović,
Crystal structure prediction of the novel Cr₂SiN₄ compound via global optimization, data mining, and the PCAE method,
Crystals 11(8), 891 (2021).
DOI: 10.3390/cryst11080891
ISSN 2073-4352, Категорија M22, ИФ2021 = 2,670

[A2] D. Zagorac, J. Zagorac, M. Pejić, B. Matović, and J. C. Schön,
Band gap engineering of newly discovered ZnO/ZnS polytypic nanomaterials,
Nanomaterials 12(9), 1595 (2022).
DOI: 10.3390/nano12091595
ISSN 2079-4991, Категорија M21, ИФ2022 = 5,3

[A3] M. Pejić, Ž. Pržulj, D. Chevizovich, N. Lazarides, G. P. Tsironis, and Z. Ivić,
Qubit-photon bound states in superconducting metamaterials,
Physical Review B 105(23), 235439 (2022).
DOI: 10.1103/PhysRevB.105.235439
ISSN 2469-9950, Категорија M21, ИФ2022 = 3,7

[A4] D. Zagorac, J. Zagorac, M. Fonović, M. Pejić, and J. C. Schön,
Computational discovery of new modifications in scandium oxychloride (ScOCl) using a multi-methodological approach,
Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie 648(23), e202200198 (2022).
DOI: 10.1002/zaac.202200198
ISSN 0044-2313, Категорија M23, ИФ2022 = 1,4

[A5] M. Pejić, D. Zagorac, J. Zagorac, B. Matović, and J. C. Schön,
Structure prediction via global energy landscape exploration of the ternary rare-earth compound LaOI,
Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie 648(24), e202200308 (2022).
DOI: 10.1002/zaac.202200308
ISSN 0044-2313, Категорија M23, ИФ2022 = 1,4

[A6] J. Zagorac, D. Zagorac, V. Šrot, M. Randelović, M. Pejić, P. A. van Aken, B. Matović, and J. C. Schön,

Synthesis, characterization, and electronic properties of ZnO/ZnS core/shell nanostructures investigated using a multidisciplinary approach,

Materials 16(1), 326 (2023).

DOI: 10.3390/ma16010326

ISSN 1996-1944, Категорија M21, ИФ2023 = 3,1

[A7] J. Zagorac, J. C. Schön, B. Matović, M. Pejić, M. Prekajski Đorđević, and D. Zagorac, *Computational discovery of new feasible crystal structures in Ce₃O₃N,*

Crystals 13(5), 774 (2023).

DOI: 10.3390/cryst13050774

ISSN 2073-4352, Категорија M21, ИФ2023 = 2,4

[A8] B. Matović, J. Maletaškić, V. Maksimović, S. P. Dimitrijević, B. Todorović, M. Pejić, D. Zagorac, J. Zagorac, Y.-P. Zeng, and I. Cvijović-Alagić,

Multicomponent solid solution with pyrochlore structure,

Boletín de la Sociedad Española de Cerámica y Vidrio 62(6), 515–526 (2023).

DOI: 10.1016/j.bsecv.2023.01.005

ISSN 0366-3175, Категорија M21, ИФ2023 = 2,7

[A9] D. T. Teppala, J. Bernauer, A. Rashid, M. Pejić, D. Zagorac, B. Matović, and E. Ionescu,

Single-source precursor synthesis of a compositionally complex early transitional metal carbonitride (Ti,Zr,Hf,Nb,Ta)_{N_xC_{1-x},}

Advanced Engineering Materials 26(18), 2302165 (2024).

DOI: 10.1002/adem.202302165

ISSN 1438-1656; 1527-2648, Категорија M22, ИФ2024 = 3,3

[A10] D. Zagorac, J. Zagorac, T. Škundrić, M. Pejić, D. Jovanović, and J. C. Schön, *Structure prediction and mechanical properties of tantalum carbide (TaC) at the ab initio level,*

Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie 650(22), e202400088 (2024).

DOI: 10.1002/zaac.202400088

ISSN 0044-2313, Категорија M23, ИФ2024 = 1,0

[A11] D. T. Teppala, M. Pejić, D. Zagorac, E. Adabifiroozjaei, N. Goyal, L. Molina-Luna, S. Mathur, B. Matović, and E. Ionescu,

Single-source precursor synthesis of a compositionally complex early transitional metal nitride (V, Nb, Ta, Mo, W)_{N_x} and its high-temperature stability,

International Journal of Applied Ceramic Technology 23(1), e70120 (2025).

DOI: 10.1111/ijac.70120

ISSN 1546-542X; 1744-7402, Категорија M22, ИФ2024 = 2,3

[A12] M. Pejić, D. D. Zimmermann, D. Zagorac, M. Fonović, J. Zagorac, J. C. Schön, and T. Schleid,

Structural exploration of holmium fluoride selenide (HoFSe): theory and experiment,

Journal of Physics and Chemistry of Solids 208, 113000 (2026).

DOI: 10.1016/j.jpccs.2025.113000

ISSN 0022-3697; 1879-2553, Категорија M21, ИФ2024 = 4,9

[A13] T. Škundrić, J. C. Schön, J. Zagorac, M. Pejić, and D. Zagorac,
Unveiling crystalline modifications on the energy landscape of $Cr_3Si_3N_8$ using the multi-methodological approach,

Computational and Theoretical Chemistry, 1256, 115632 (2026).

DOI: 10.1016/j.comptc.2025.115632

ISSN 2210-271X, Категорија M22, ИФ2024 = 2,8

[A14] I. Zhukova, M. Tatarková, V. Kombamuthu, D. Zagorac, M. Pejić, Z. Chlup, A. Kovalčíková, F. Šiška, F. C. Hernández, B. M. Moshtaghioun, D. Gómez-García, N.

Hosseini, B. Matović, I. Dlouhý, and P. Tatarko,

Theoretical prediction, synthesis, and mechanical properties of non-equimolar (Ta-Hf-Zr-Nb-Ti) B_2 entropy-stabilised borides,

Journal of the European Ceramic Society 46(3), 117903 (2026).

DOI: 10.1016/j.jeurceramsoc.2025.117903

ISSN 0955-2219; 1873-619X, Категорија M21a, ИФ2024 = 6,2

[A15] T. Škundrić, J. Zagorac, M. Pejić, A. Luković, and D. Zagorac,

First-principles study of $CsSnX_3$ ($X = Cl, F$) lead-free inorganic halide perovskites: Structural and electronic properties,

Journal of Solid State Chemistry 362, 126144 (2026).

DOI: 10.1016/j.jssc.2026.126144

ISSN 0022-4596; 1095-726X, Категорија M21, ИФ2024 = 3,5

Радови у осталим међународним часописима

[A16] J. Zagorac, D. Zagorac, T. Škundrić, M. Pejić, B. Matović, and J. C. Schön,
Theoretical insight into structural and mechanical features of $Hf_{0.5}Ta_{0.5}C$,

Processing and Application of Ceramics 19(2), 201–213 (2025).

DOI: 10.2298/PAC2502201Z

ISSN 1820-6131; 2406-1034, Категорија M23, ИФ2024 = 0.8

В. Радови у зборницима међународних конференција

Предавања по позиву

[B1] M. Pejić,

Energy Landscapes, Crystal Structure Prediction and Modeling of Multicomponent Rare Earth Compounds,

Energy Landscapes 2024 Lovran, 25-30 August 2024, Lovran, Croatia

Усмена излагања

[B2] M. Pejić, D. Zagorac, J. Zagorac, T. Škundrić, D. Jovanović, and B. Matović,

First-principles investigation and structure prediction in holmium(III) fluoro-selenide system,
6th Conference of the Serbian Society for Ceramic Materials, 6CSCS-2022, 28-29 June 2022, Belgrade, Serbia

[B3] M. Pejić, D. Zagorac, J. Zagorac, T. Škundrić, and B. Matović,
Structural properties of multicomponent solid solutions with pyrochlore structure on DFT level,
7th Conference of the Serbian Society for Ceramic Materials, 7CSCS-2023, 14-16 June 2023, Belgrade, Serbia

[B4] M. Pejić, J. Zagorac, T. Škundrić, M. Fonović, and D. Zagorac,
Machine learning in energy landscape exploration: ANN-assisted high-pressure polymorph discovery in LaFS,
3rd International Conference on Innovative Materials in Extreme Conditions, IMEC2026, 25-27 March 2026, Belgrade, Serbia

Постер презентације

[B5] M. Pejić, D. Zagorac, J. Zagorac, T. Škundrić, D. Jovanović, and B. Matović,
Energy landscape and crystal structure investigations of holmium(III) fluoro-selenide HoFSe,
1st International Conference on Innovative Materials in Extreme Conditions, IMEC2022, 22-23 March 2022, Belgrade, Serbia.

[B6] M. Pejić, D. Zagorac, J. Zagorac, T. Škundrić, D. Jovanović, and B. Matović,
Theoretical study of ground state properties of Na⁺, Cs⁺, Mg²⁺ and Ba²⁺ doped mayenite and its electride forms under extreme conditions,
1st International Conference on Innovative Materials in Extreme Conditions, IMEC2022, 22-23 March 2022, Belgrade, Serbia.

[B7] M. Pejić, D. Zagorac, J. Zagorac, T. Škundrić, D. Jovanović, and B. Matović,
Energy landscape exploration of novel ternary rare-earth compound LaIO,
6th Conference of the Serbian Society for Ceramic Materials, 6CSCS-2022, 28-29 June 2022, Belgrade, Serbia.

[B8] M. Pejić, D. Zagorac, J. C. Schön, J. Zagorac, T. Škundrić, and B. Matović,
Energy landscape and crystal structure investigations of lanthanum fluorosulfide LaFS,
7th Conference of the Serbian Society for Ceramic Materials, 7CSCS-2023, 14-16 June 2023, Belgrade, Serbia.

[B9] M. Pejić, D. Zagorac, J. Zagorac, T. Škundrić, D. Jovanović, and B. Matović,
Energy Landscape Exploration of Novel Rare Earth Chalcogenides LaXY (X=O,S; Y=I,F),
2nd International Conference on Innovative Materials in Extreme Conditions, IMEC2024, 20-22 March 2024, Belgrade, Serbia.

[B10] M. Pejić, D. Zagorac, J. Zagorac, T. Škundrić, D. Jovanović, M. Fonović, and B. Matović,
Modeling of multicomponent rare earth compounds: Energy landscape exploration, structure prediction, and electronic properties calculation,
8th Conference of the Serbian Society for Ceramic Materials, 8CSCS-2025, 18-20 June 2025, Belgrade, Serbia.

[B11] M. Pejić, D. Zagorac, J. C. Schön, J. Zagorac, T. Škundrić, M. Fonović, and B. Matović,
Modeling ternary rare earth compounds: from global search to electronic structure prediction,

3rd International Conference on Innovative Materials in Extreme Conditions, IMEC2026, 25-27 March 2026, Belgrade, Serbia.

Д. Радови у домаћим часописима

- [Д1] J. Zagorac, B. Matović, M. Pejić, K. Milutinović, and D. Zagorac, *Crystal structure and properties of theoretically predicted AlB_{12}* , Journal of Innovative Materials in Extreme Conditions, Vol. 1, pp. 28-36 (2020).
- [Д2] J. Zagorac, D. Zagorac, D. Jovanović, M. Pejić, T. Škundrić, and B. Matović, *Ab initio investigations and behavior of the α - Ce_2ON_2 phase in the extreme pressure conditions*, Journal of Innovative Materials in Extreme Conditions, Vol. 2, Issue 2, pp. 36-43 (2021).
- [Д3] T. Škundrić, D. Zagorac, M. Pejić, J. Zagorac, and B. Matović, *DFT study of the Cr_2SiN_4 under extreme pressure conditions*, Journal of Innovative Materials in Extreme Conditions, Vol. 3, Issue 1, pp. 9-18, (2022).
- [Д4] D. Zagorac, M. Fonović, J. Zagorac, M. Pejić, J. C. Schön, *Theoretical models of scandium oxychloride in extreme conditions*, Journal of Innovative Materials in Extreme Conditions, Vol. 3, Issue 1, pp. 19-29, (2022).
- [Д5] M. Pejić, D. Zagorac, J. Zagorac, T. Škundrić, and B. Matović, *Theoretical study of ground state properties of Na^+ , Cs^+ , Mg^{2+} and Ba^{2+} doped mayenite and its electrider forms under extreme conditions*, Journal of Innovative Materials in Extreme Conditions, Vol. 3, Issue 1, pp. 30-42, (2022).
- [Д6] T. Škundrić, D. Zagorac, M. Pejić, D. Jovanović, J. Zagorac, M. Fonović, B. Matović, *Theoretical modifications of $CrSi_2N_4$ at extreme conditions*, Journal of Innovative Materials in Extreme Conditions, Vol. 5, Issue 2, pp. 92-105 (2024).
- [Д7] D. Zagorac, J. Zagorac, T. Škundrić, M. Pejić, K. Yadav, D. Jovanović, I. Cvijović-Alagić, and D. L.V. K. Prasad, *Novel modifications of Ti_4Nb alloy: A multi-methodological approach*, Journal of Innovative Materials in Extreme Conditions, Vol. 5, Issue 2, pp. 144-152 (2024).

4. ЦИТАТИ

- [A4] D. Zagorac, J. Zagorac, M. Fonović, M. Pejić, and J. C. Schön, *Z. Anorg. Allg. Chem.* 648(23), e202200198 (2022).
1. Škundrić T., Schon J.C., Zagorac J., Pejić M., Zagorac D. *Comput. Theor. Chem.* 1256, 115632 (2026).
 2. Sharma G., Sharan A., Singh N. *Comp. Mat. Sci.* 261, 114304 (2026).
 3. Pejić M., Zimmermann D. D., Zagorac D, Fonović M., Zagorac J., Schön J. C., Schleid T. *J. Phys. Chem. Solids.* 208, 113000 (2026).
 4. Fonović M., Zagorac J., Čebela M., Jordanov D., Zagorac D. *Struct. Dyn.* 12(2), 024101 (2025).

5. Matović B., Belozerova N.M., Kozlenko D.P., Zel I. Y., Maletaškić J., Zagorac D., Butulija S., Cvijović-Alagić I. *Ceram. Int.* 50(24) (2024).
6. Teppala D. T., Bernauer J., Rashid A., Pejić M., Zagorac D., Matović B., Ionescu E. *Adv. Eng. Mater.* 26(18), 2302165 (2024).
7. Hoppe H. *Rare Earth Elements Solid State Materials Chemical Optical and Magnetic Properties* (2024).
8. Škundrić T., Schön J.C., Zarubica A., Fonović M., Zagorac D. *Z. Anorg. Allg. Chem.* 649(22), e202300130 (2023)
9. Hou L., Dong L., Shi P., Su J., Tu Y., Zhang Y., Wang B. *ACS Appl. Nano Mater.* 6(16) (2023).
10. Zagorac J., Zagorac D., Šrot V., Randelović M., Pejić M., van Aken P. A., Matović B., Schön J. C. *Materials* 16(1), 326 (2023).
11. Buyer C., Grossholz H., Wolf S., Zagorac D., Zagorac J., Schön J. C., Schleid T. *Cryst. Growth Des.* 22(12) (2022).

[A5] M. Pejić, D. Zagorac, J. Zagorac, B. Matović, and J. C. Schön, *Z. Anorg. Allg. Chem.* 648(24), e202200308 (2022).

1. Pejić M., Zimmermann D. D., Zagorac D., Fonović M., Zagorac J., Schön J. C., Schleid T. *J. Phys. Chem. Solids.* 208, 113000 (2026).
2. Čebela M., Šenjug P., Zagorac D., Popov I., Zagorac J., Rosić M., Pajić D. *Materials* 18(7), 1453 (2025).
3. C. Wood B., Fjellvåg H., Rowberg A. J.E., Witman M. D., Wood B. C., Kang S.Y., Heo T. W., Li S., Alvares E., Jerabek P., Song Y., Sellschopp K. *Metal Hydrides for Hydrogen Based Energy Storage Vol. 1 Fundamentals* (2025).
4. Zagorac D., Prasad D. L. V. K., Škundrić T., Yadav K., Singh S., Laketić S., Zagorac J., Momčilović M., Cvijović-Alagić I. *CrystEngComm* 26(22) (2024).
5. Zagorac D., Buyer C., Zagorac J., Škundrić T., Schön J. C., Schleid T. *Cryst. Growth Des.* 24(4) (2024).
6. Zagorac D., Zagorac J., Djukic M. B., Bal B., Schön J. C. *Procedia Struct. Integr.* 54 (2024).
7. Čebela M., Zagorac D., Popov I., Torić F., Klasner T., Skoko Ž., Pajić D. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 25(33) (2023).
8. Zagorac J., Schön J. C., Matović B., Pejić M., Prekajski Đorđević M., Zagorac D. *Crystals* 13(5), 774 (2023).

[A7] J. Zagorac, J. C. Schön, B. Matović, M. Pejić, M. Prekajski Đorđević, and D. Zagorac, *Crystals* 13(5), 774 (2023).

1. Škundrić T., Schön J.C., Zagorac J., Pejić M., Zagorac D. *Comput. Theor. Chem.* 1256, 115632 (2026).
2. Zagorac D., Zagorac J., Škundrić T., Pejić M., Jovanović D., Schön J. C. *Z. Anorg. Allg. Chem.* 650(22) e202400088 (2024).
3. Škundrić T., Schön J.C., Zarubica A., Fonović M., Zagorac D. *Z. Anorg. Allg. Chem.* 649(22), e202300130 (2023)

[A12] M. Pejić, D. D. Zimmermann, D. Zagorac, M. Fonović, J. Zagorac, J. C. Schön, and T. Schleid, *J. Phys. Chem. Solids.* 208, 113000 (2026).

1. Mezouar R., Okba F., Zagorac D., Daoud S., Benmakhlof A. *Comput. Mater. Contin.* 88(1), 16 (2026).

5. ОЦЕНА ИЗВЕШТАЈА О ПРОВЕРИ ОРИГИНАЛНОСТИ ДОКТОРСКЕ ДИСЕРТАЦИЈЕ

ОЦЕНА ИЗВЕШТАЈА О ПРОВЕРИ ОРИГИНАЛНОСТИ ДОКТОРСКЕ ДИСЕРТАЦИЈЕ

На основу Правилника о поступку провере оригиналности докторских дисертација које се бране на Универзитету у Београду и налаза у извештају из програма iThenticate, којим је извршена провера оригиналности докторске дисертације “Energy Landscapes, Crystal Structure Prediction, and Modeling of Rare Earth Ternary Compounds“ (“Енергетски пејзажи, предвиђање кристалних структура и моделовање тернарних једињења елемената ретких земаља“), аутора Милана Пејића, констатујем да утврђено подударање текста износи 1%. Приликом одређивања степена подударности програмом iThenticate искључени су библиографија и претходно публиковани резултати истраживања докторанта, и подешена је опција “Exclude matches that are less than 15 words“. Овај степен подударности последица је коришћења стандардних математичких формула, као и општих научних формулација карактеристичних за област истраживања, тзв. општих места и података, што је у складу са чланом 9. Правилника.

На основу свега изнетог, а у складу са чланом 8. став 2. Правилника о поступку провере оригиналности докторских дисертација које се бране на Универзитету у Београду, изјављујем да извештај указује на оригиналност докторске дисертације, те се прописани поступак припреме за њену одбрану може наставити.

Београд, 26. јун 2026. године

Ментор



др Дејан Загорац, научни саветник

Универзитет у Београду

Институт за нуклеарне науке “Винча”

З А К Л Ј У Ч А К

На основу свега изложеног, Комисија закључује да докторска теза **Милана Пејића** под насловом *Energy Landscapes, Crystal Structure Prediction, and Modeling of Rare Earth Ternary Compounds* (*Енергетски пејзажи, предвиђање кристалних структура и моделовање тернарних једињења елемената ретких земаља*) даје оригиналан и значајан допринос области физике кондензованог стања материје. Кандидат је остварио како теоријско-методолошке доприносе у развоју и примени метода за истраживање енергетских пејзажа, тако и нове физичке увиде у полиморфизам, стабилност и физичка својства пет одабраних тернарних једињења елемената ретких земаља. Остварени резултати су објављени у четири рада у водећим међународним научним часописима. Комисија констатује да су задовољени сви прописани услови за одобравање одбране тезе. Стога предлажемо Наставно-научном већу Физичког факултета да одобри њену јавну одбрану.

У Београду, 01.07.2026.

Чланови комисије

др Ђорђе Спасојевић
редовни професор Физичког факултета Универзитета у Београду

др Горан Попарић
редовни професор Физичког факултета Универзитета у Београду

др Божидар Николић
ванредни професор Физичког факултета Универзитета у Београду

др Јелена Загорац
научни саветник Института за нуклеарне науке "Винча"

др Владимир Јовановић
виши научни сарадник Института за мултидисциплинарне студије