

Научном већу Института за физику у Београду

На редовној седници Научног већа Института за физику одржаној 15. јуна 2015. именовани смо за чланове комисије за избор др Игора Попова у звање *виши научни сарадник*.

Извршили смо анализу научно-истраживачке активности кандидата на основу које подносимо следећи

ИЗВЕШТАЈ

1. Стручно-биографски подаци

Др Игор Попов је рођен 11. фебруара 1977. године у Београду. Завршио је Основну школу "Влада Аксентијевић" као ђак генерације. По завршетку Математичке гимназије у Београду започиње основне студије на Физичком факултету у Београду на Б смеру - теоријска и експериментална физика, где је дипломирао 2003. године. Током основних студија остварио је просечну оцену 9.25. Дипломирао је са оценом 10 коју је добио за тезу "Реализација карактеристичних квантних кола на SQUID-овима".

Неколико месеци после дипломирања Игор Попов је започео докторске студије на Техничком универзитету у Дрездену у групи проф. Готарда Зајферта (Gotthard Seifert). Током докторских студија бавио се теоријским истраживањем из више области а резултате свог рада објавио је у више еминентних међународних научних часописа. Користећи претежно нумеричко-теоријске методе а нарочито теорију густине функционала и сродне методе истраживао је молибден халкогенидне наножице, електронске контакте, кластере на металним површинама, дводимензионалне материјале, течне кристале и нанотубе. Докторирао је 2008. године са оценом *summa cum laude* (са највишом чашћу). Овом оценом докторира свега око 2% најуспешнијих доктораната на Техничком универзитету у Дрездену. Добитник је Prof.-Schwabe награде "за изузетна достигнућа приликом рада на његовој докторској дисертацији Молибден халкогенидне наножице као градивни елементи наноуређаја" (цитат из документа награде). Ово признање Технички универзитет у Дрездену традиционално додељује од 1970. године једном годишње.

2009. године добија постдокторску позицију на Тринити колеџу у Даблину у групи за спинтронику професора Стефана Санвита (Stefano Sanvito). Тамо наставља истраживања из више области али и одржава међународне сарадње које је започео током докторских студија. На пример у сарадњи са две дрезденске (проф. Gianauelio Cuniberti и проф. Gotthard Seifert) и једном

америчком групом (проф. David Tomanek) објављује више публикација на тему графена и молибден дисулфидних дводимензионих материјала, док је плод мултилатералне међународне сарадње са израелском (проф. Reshef Tenne) и руском групом (др Andrey Enyashin) такође једна добро цитирана публикација.

Др Игор Попов је био коментор два докторанта у даблинској групи а помагао је у истраживању и једној докторанткињи у дрезденској групи. Четири заједничка рада су производ те сарадње.

Одржао је предавања на више међународних конференција а поред тога позван је два пута да одржи предавања такође на мађународним конференцијама. Одржао је и свечано предавање поводом добијања Prof.-Schwabe награде.

Прихваћен му је пројекат НРС_13_00740 - Теоријско истраживање преноса спинске обртне силе из првих принципа (ен. Ab initio research of spin transfer torque) на основу којег су му додељени сати на рачунарском кластеру Келвин у Тринити колеџу.

У оквиру групе Проф. Радоша Гајића водиће подпројекат на заједничком међународном пројекту са групом Емануела Капелутија. Шифра и назив пројекта су PGR02900 - *Спектроскопије графена и дводимензионих пост-графене материјала* (ен. *Spectroscopies in graphene and 2D post-graphene materials*). Циљ подпројекта је теоријско одређивање структурних, електронских и транспортних особина графена, MoS₂ и других дводимензионих материјала.

Рецензент је у водећим научним часописима Nano Letters и Physical Chemistry Chemical Physics.

2. Научно-истраживачки рад

Др Игор Попов одликује широк распон научно-истраживачке делатности и интересовања. Током израде свог дипломског рада бавио се квантним рачунарством на суперпроводним квантним интерферентним уређајима (ен. superconducting quantum interference devices). Током својих докторских студија а потом у наставку своје научне каријере као постдок радио је на истраживању структурних, електронских и транспортних особина наножица, нанотуба, кластера на металним површинама, контаката, молекуларне динамике течних кристала, електронских особина тополошких изолатора, електронских и магнетних особина кристала, итд. Највише се бавио халкогенидима и дводимензионалним материјалима у којима је објавио највећи број научних радова. Већину радова је објавио у најеминентнијим међународним часописима категорије M₂₁. Сумарно листа објављених радова, а која се узима у обзир за додељивање научног звања, укључује:

12 радова у часописима категорије M₂₁

2 рада у часописима категорије M₂₂

2 рада у часописима категорије M₂₃

Треба напоменути да је објавио 3 рада у Physical Review Letters и један у Nano Letters као први аутор. Наведени часописи спадају у најцењеније научне часописе. У време писања молбе за стицање научног звања цитираност научних радова кандидата је тачно 300.

Др Игор Попов спроводи истраживања користећи превасходно теоријске методе. Оне укључују широк дијапазон нумеричких метода: теорију густине функционала (ен. density functional theory - DFT), density functional-based tight binding метод (DFTB), молекуларну динамику, Гринове функције у спрези са DFT и DFTB при изучавању електронског транспорта, али и аналитичке методе на пример при класификацији симетрије стања итд.

2.1 Дипломски рад

У свом дипломском раду на тему "Реализација карактеристичних квантних кола на SQUID-овима" Игор Попов се бавио истраживањем примене SQUID-ова (суперпроводних квантних интерферентних уређаја) у квантном рачунарству. Квантно рачунарство је једна релативно млада наука која повезује две области: квантну физику и рачунарство. Коначни циљ квантног рачунарства је квантни рачунар, који директно користи феномене квантне механике у одређеним квантним системима у циљу обраде података. Могућности квантних рачунара су велике и огледају се у томе да би се неки захтевни рачунарски проблеми могли решити за много редова величине брже квантним него класичним рачунарима.

Зарад остваривања циља градње квантног рачунара потребна је потпуна контрола квантних система на којима би потенцијални кванти рачунар радио, од препаратације жељеног квантног стања, његове временске еволуције до коначног мерења над тим квантним стањем. Један од најперспективнијих система за градњу квантних рачунара су SQUID-ови. SQUID је суперпроводни прстен који садржи Џозефсонов спој. Суперструја кроз овај квантни систем може да тече у оба смера истовремено у прстену, што фактички чини квантну суперпозицију. Дипломски рад др Игора Попова се бави препаратацијом те квантне суперпозиције применом спољашњег временски зависног магнетног поља на SQUID-овима. Његово истраживање је било изведено из неколико корака. Прво, користећи класичну електродинамику и теорију о струјним колима је извео класичан хамилтонијан који представља класични аналогон квантног SQUID-а. Потом је користећи канонску квантизацију дошао до квантног хамилтонијана SQUID-а у спољашњем магнетном пољу. Друго, после аналитичког извођења трансформисао је све добијене математичке изразе у форме које су прилагођене нумеричким прорачунима на рачунару. Треће, написао је софтвер који обавља те прорачуне. За ту сврху користио је програмске језике C, C++ и Wolfram Mathematica. Четврто, примењујући тај софтвер изучавао је препаратацију квантне

суперпозиције стања у SQUID-овима у разним временски променљивим магнетним пољима. Главни резултат Дипломског рада је комплетно теоријско разумевање везе компонената квантног система и магнетног поља. На основу тих сазнања одређене су како квантитативне тако и квалитативне карактеристике временских зависности спољашњег магнетног поља на постизање жељених суперпозиција квантних стања SQUID-а.

2.2 Докторски рад

Игор Попов се у својој докторској дисертацији бавио истраживањем молибден халкохалидних нанокластера и наножица, а то истраживање је у више детаља описано у наредним одељцима (2.3, 2.4, 2.5, 2.6).

2.3 Молибден сулфидни нанокластери на златним субстратима - функционализација племенитих метала

Јако хемијско везивање између сумпора и племенитих метала (злата и сребра) се често користи у основним и примењеним истраживања за повезивање реактивно-инертних племенитих метала са поларним материјалима, нпр. у циљу интеграције биохемијских маркера или фабрикације самоорганизованих монослојева функционализованих тиолских једињења. Молибден сулфидни нанокластери на металним површинама су познати катализатори за десулфуризацију, што се користи за производњу горива са ниском концентрацијом сумпора. Др Попов је у две публикације објавио резултате својих теоријских истраживања стабилности и реактивности молибден сулфидних нанокластера на златним површинама користећи теорију густине функционала (ен. density functional theory - DFT) са Трулијер-Мартинс псевдопотенцијалима, базисом равних таласа, апроксимацијом локалне густине (ен. local density approximation - LDA) и уопштеном градијентном апроксимацијом (ен. generalized gradient approximation - GGA). Прво је систематски приступљено структурној оптимизацији кластера на златном субстрату за, са једне стране различите оријентације кластера, и са друге стране различите позиције кластера на одговарајућим местима на субстрату. Структура једног оваквог система се може анализирати са много више детаља него што је то могуће чак и са најбољим модерним експерименталним методама, јер је могућ увид у позицију сваког појединачног атома. Теоријско-нумеричке методе тако чине један значајан комплемент експерименталном истраживању. Поред структурне анализе кандидат је утврдио и везивне енергије ових кластера на златном субстрату и тиме теоријски "предвидео" највероватније геометрије (позиције и оријентације) кластера на површинама, као и структурне деформације површине и кластера. Потом је анализирана електронска структура система, природа кластер-субстрат веза и промене

електронске структуре самих кластера по њиховом везивању за површине. У том циљу израчунате су и анализирани тоталне и пројектоване густине стања и поређене између слободних и депозитованих кластера. Ова истраживања др Игора Попова укључују теоријско "предвиђање" да кластер чија величина је сразмерна параметрима кристалне решетке златног субстрата има стриктну преферентну позицију на површини где се везује за исту, док кластер који није сразмеран параметрима решетке има неколико енергетски релативно дегенерисаних позиција, што сугерише могућност за делимично слободно померање тог кластера по површини. Такође кластери задржавају своје редукционе реактивне особине по њиховој депозицији на златној површини. Главни резултат ових истраживања кандидата је сазнање да изучавани кластери испуњавају све услове да буду градивни елементи за формирање стабилних редокс-активних неорганских монослојева на златним субстратима. Резултати су објављени у Phys. Rev. B 75, 245436 и Eur. Phys. J. D 45, 439.

2.4 Молибден халкохалидне наножице - неочекивана подударност са угљеничним нанотубама

Угљеничне нанотубе се већ дуже време сматрају као потенцијално добри градивни елементи будућих уређаја у наноелектроници. Међутим неколико мана одликује ове квази-једнодимензионе системе: електронске особине зависе од киралности нанотуба, још увек не постоји метод за фабрикацију нанотуба са унапред жељеном киралношћу (тима и жељеним електронским особинама), угљеничне нанотубе имају тенденцију груписања у снопове (чије електронске особине зависе од комплексног "збира" електронских особина појединачних нанотуба у снопу). Због ових недостатака постоје озбиљне потешкоће у фабриковању електронских система на бази нанотуба са жељеним и унапред предвидивим електронским карактеристикама. За разлику од нанотуба молибден халкохалидне наножице нису довољно изучаване иако су одавно експериментално реализоване. Истраживања др Игора Попова су показала да ове неорганске наножице имају сличне електронске особине као угљеничне нанотубе, а поред тога немају мане које одликују нанотубе. Користећи DFT са псеудопотенцијалима, локалним базисом и LDA апроксимацијом (Siesta softver) кандидат је истраживао структурне, електронске и транспортне особине $\text{Mo}_6\text{S}_{6-x}\text{I}_x$ наножица. Одређена је најстабилнија стоихиометрија ($x = 2$) а потом израчунат Јунгов модул еластичности који је упоређен са Јунговим модулом угљеничних нанотуба. Показано је да су ове наножице механички чврсте као нанотубе, а потоње се сматрају за једне од најјачих материјала, превазилазећи челик за неколико редова величине. Користећи *tight-binding* метод базиран на DFT-у (ен. density functional-based tight binding method - DFTB) са додатом Van der Waals интеракцијом кандидат је потом изучавао енергију везивања ових наножица у сноповима и дошао до интересантног и изненађујућег теоријског "предвиђања". Ове жице на одређеним температурама се међусобно одбијају, услед специфичне међусобне оријентације јона јода у наножицама и њиховог електростатичног одбијања. Затим су електронске особине угљеничних нанотуба и молибден

халкохалидних наножица упоређене. Све наножице независно од њихове стоиحيометрије су металне а електронске особине Mo_6S_6 наножице су веома блиске тзв. armchair нанотубама (то су нанотубе са киралношћу (x,x)) то јест имају линеарне зоне око Фермијевог нивоа. Сходно томе наножице имају квалитативно врло сличне транспортне особине као armchair нанотубе а и квантитативно су најближе $(13,13)$ нанотубама. Главни резултати овог истраживања су теоријска "предвиђања" да молибден халкохалидне наножице имају предности угљеничних нанотуба, као што су линеарна дисперзија електронских зона и велики Јунгов модуо еластичности, а са друге стране немају недостатке нанотуба као што је зависност особина нанотуба од њихове киралности (ове наножице немају дефинисану киралност) и проблем при издвајању појединачних нанотуба из снопова. Ови резултати су објављени у Phys. Rev. Lett. 99, 085503.

2.5 Молибден сулфидне наножице - контакти са златним електродама

Логични наставак истраживања молибден сулфидних кластера на златним површинама и особина молибден халкохалидних наножица јесу контакти ових жица са златним електродама. Наиме Mo_6S_8 кластери представљају елементарну ћелију Mo_6S_6 наножица, са отклоњена 2 сумпорна атома. Локалне геометрије контаката ових наножица са златом су фактички исте са геометријама изучаваним у одељку 2.3. У овом истраживању др Попов је користио DFTB методу са Гриновим функцијама. Гринов формализам омогућава изучавање отворених система у којима је систем од интереса повезан са одређеним полубесконечним резервоарима. У овом конкретном случају резервоари представљају полубесконечне електроде а наножице су материјал чији се електронски транспорт изучава. Две контактне геометрије су биле посебно од интереса. Једна у којој је молибден у директном контакту са електродом и друга у којој то није случај. Истраживање кандидата је показало да први контакт има знатно боље карактеристике, са знатно мањом потенцијалном баријером него у другом контакту. Разлог томе је сама структура ових наножица. Она се састоји из "унитарње" наножице сачињене од молибдена и сумпора који је "декорише" споља. Пројектована густина стања је показала да је комплетан транспорт кроз молибден док сумпор не доприноси транспорту. Са друге стране, као што је кандидат увидео у ранијим истраживањима (одељак 2.3) сумпор је заслужан за везивање са златном електродом. Дакле најинтересантнији резултат овог истраживања је да у контактима између златних електрода и молибден сулфидних наножица постоји подела посла. Док сумпор везује наножицу за электроду својим ретким афинитетом да се везује за племените метале (за разлику од већине других елемената), молибден је задужен за електронски транспорт. Ово истраживање је објављено у Appl. Phys. Lett. 93, 083115.

2.6 Молибден сулфидне наножице - нарушење симетрије и електромеханички прекидач

Кандидат је истраживао постојаност електронских и транспортних особина молибден сулфидних наножица при њиховим механичким деформацијама. Експериментално је раније показано да проводност угљеничних нанотуба осцилује са повећањем торзионог угла при увијању нанотуба око њихове осе симетрије, док се само занемарљиво мења при савијању нанотуба до одређеног угла. За релативно веће углове савијања настају значајније деформације у попречном пресеку нанотубе што узрокује и значајније промене у транспортним особинама савијених нанотуба. Насупрот томе теоријско истраживање кандидата је предвидело различите особине при овим механичким деформацијама. Прво, молибден сулфидне наножице задржавају не само свој структурни интегритет чак и при великим угловима савијања, већ и електронске особине остају непромењене. Друго, увијање наножице око сопствене осе симетрије узрокује метал - полупроводник трансформацију, са забрањеном зоном полупроводника која се проширује линеарно са повећањем торзионог угла. Разлог за ово др Попов увиђа у нарушењу симетрије наножице. Наиме наножица има C_{3v} симетрију коју карактеришу 2 иредуцибилне репрезентације (a_1 и a_2) које се секу близу Фермијевог нивоа. Увијањем наножице долази до нарушења симетрије која постаје C_3 . У овој групи a_1 и a_2 иредуцибилне репрезентације постају једна иредуцибилна репрезентација (a), те долази до мешања иницијалних стања (a_1 и a_2) од којих је ново стање (a) увијене жице настало. Услед тог мешања стања настаје забрањена зона. Главни резултат истраживања је да се ове металне наножице могу искористити као електромеханички нанопрекидачи. Ово интересантно истраживање је изведено DFTB методом са Гриновим функцијама а објављено је у Nano Lett. 8, 4093.

2.7 Нови материјали за супериорне електричне контакте

Интересовање за MoS_2 монслојеве и друге халкохалидне прелазне метале (ен. transition metal chalcogenides - ТМС) је у огромном успону последњих неколико година и прати тренд популарности графена као дводимензиони материјали. Међу осталом 2011. године је фабрикован MoS_2 транзистор са одличним особинама. У свом истраживању др Игор Попов предлаже да се транзисторске особине могу значајно унапредити побољшањем MoS_2 /метал контаката. А за електроде предлаже употребу титанијума уместо злата које се већ деценијама стандардно користи као електрода у наноконтактима. Кандидат запажа 2 услова која морају бити испуњена да би се остварио квалитетан Омски контакт:

(а) да потенцијална баријера буде што ужа и нижа

(б) да, по могућству, постоје резонантна стања, тј. ненулта локална густина стања у целој просторној регији интерфејса

Истраживање кандидате указује да титанијум има параметре кристалне решетке као и симетрију које одговарају кристалу MoS_2 монослоја. MoS_2/Ti контакти имају потенцијалну баријеру која је значајно мања него баријера у MoS_2/Au контакту а за ред величине већа локална густина стања је присутна у MoS_2/Ti контакту у односу на MoS_2/Au контакт. Поред тога у MoS_2/Ti контакту је Фермијев ниво померен унутар проводне зоне. Исти је случај и са MoS_2/Au контактом са тим што је разлика у знатно већој тоталној густини стања у случају Ti електроде. Кандидат је одабрао за електроду елемент из периодног система који има велики атомски радијус. Интересантно је запажање да је структура MoS_2 таква да се састоји из једног моноатомског Mo слоја који је усендвичен са 2 сумпорна слоја, по једним са обе стране. Електронски транспорт кроз MoS_2 доминира кроз Mo слој, јер су стања око Фермијевог нивоа претежно локализована на Mo слоју. Дакле да би струја потекла кроз $\text{MoS}_2/\text{метал}$ контакт потребно је да прође преко S слоја и достигне стања у Mo слоју, тј. да постоји што боље преклапање површинског стања метала са локалним стањима Mo слоја. То је релативно велика удаљеност па аутор увиђа да коришћење титанијума као елемента са знатно већим атомским радијусом од радијуса злата доприноси том циљу. Главни квалитет овог истраживања је што је дало шаблон за истраживања контаката квантним прорачунима. Ово истраживање је најцитираније кандидата а објављено је у Phys. Rev. Lett. 108, 156802.

2.8 Неочекивана јединствена коегзистенција магнетизма и антифероелектричног уређења у кристалу без уобичајених магнетних елемената (прелазних метала)

У овом истраживању др Попов прелази две границе конвенционалног схватања о магнетизму и електрицитету. Прво, појављивање магнетног момента је веома ретко у системима без елемената са полупопуњеним d или f орбиталама. Ови елементи имају неспарене локализоване спинове што је најчешћи узрок магнетизма у магнетима. Друго, сматра се да локализовани електрични диполи не могу да постоје у металима. У њима велика густина електрона екранизује локална наелектрисања. Кандидат у свом истраживању налази да је MgV_6 истовремено антифероелектрични метал са магнетним моментима који могу евентуално градити феромагнетно уређење. Прво интересантно предвиђање овог истраживања је да за разлику од добро проучених CaV_6 , SrV_6 и BaV_6 кристала, који се одликују централном симетријом, у MgV_6 кристалу та симетрија је нарушена услед померања магнезијума од центра овог просто-кубичног кристала. Узимајући у обзир да је у питању јонски кристал са Mg катјонима, настаје локални диполни моменат. Као разлог нарушења симетрије аутор уочава знатно мањи јонски радијус Mg у односу на Ca , Sr и Ba . Ови диполни моменти међусобно интерагују класичном дипол-дипол интеракцијом и стварају антифероелектрични поредак. Поред електричног уређења и магнетизам се појављује у овом систему са дефектима, тј. са недостатком V атома (увођењем појединачних V шупљина у кристал). Користећи теорију група и DFT калкулације са локалним базисом, псеудопотенцијалима и LDA/GGA апроксимацијом функционала, др Игор Попов показује физичку основу настанка магнетног момента, а потом и "предвиђа" постојање магнетног уређења које је

највероватније из неке егзотичне класе него уобичајени (анти)ферромагнетизам. Док је MgB_6 кристал без дефеката полупроводник, дефекти стварају ненулту густину наелектрисања делимично локализовану око дефекта. Тај облак наелектрисања носи магнетни моменат. Интересантно да је то стање, тј. електронски облак просторно оријентисан. Наиме приближно има облик игле дужине око 8 ангстрема. У случају преклапања тих стања (за шта је потребна довољно велика концентрација дефеката) долази до настанка магнетног уређења. Друга важна последица таквог просторног облика стања је мала тотална густина стања у кристалу, у којем постоје области које нису покривене тим електронским облацима око шупљина. Ту је и слаба екранизација локалног диполног момента а што омогућава наведену коегзистенцију магнетног и електричног уређења MgB_6 кристала. Главни резултат овог истраживања је "предвиђање" коегзистенције електричног и магнетног уређења у материјалу без д или ф елемената. Ови интересантни резултати су објављени у Phys. Rev. Lett. 108, 107205.

2.9 Индукција тополошки заштићеног стања у графену при његовом контакту са тополошким изолатором

Тополошки изолатори представљају једну нову класу материјала. Карактеристично за њих је постојање металних стања на површинама (или ивицама у случају дводимензионих тополошких изолатора). Металност ових стања је немогуће нарушити немагнетним дефектима због специфичне тополошке структуре електронских зона тополошког изолатора. Потпуно супротан случај је у графену, код кога настаје забрањена зона при појави најмањих дефеката. То је и једна од највећих мана овог популарног материјала. Др Попов предлаже решење овог проблема постављајући графен у контакт са тополошким изолатором Bi_2Se_3 . Помоћу DFT прорачуна (VASP софтвер, базис равних таласа, GGA функционал) анализира еволуцију стања графена како се он приближава површини тополошког изолатора. Интересантно, прво се отвара забрањена зона у графену што кандидат приписује савијању Брилуенове зоне при којем сви Диракови конуси графена из K и K' тачака зоне прелазе Г тачку. Како ови конуси имају супротне киралности они се "анихиларају" тј. на њиховом месту настаје забрањена зона, која постаје већа са даљим приближавањем графена површини тополошког изолатора. Неочекивано при мањим раздаљинама тополошки заштићено стање прелази са површине изолатора на графене. То стање задржава своје тополошке особине, на пример хеликално спинско уређење које онемогућава тоталну рефлексију (ен. back-scattering) транспортних електрона при наиласку на дефекте у материјалу. Ако добије експерименталну потврду ово теоријско "предвиђање" би могло да има велику примену у коришћењу графена у будућој наноелектроници. Кандидат је предложио и експеримент којим би се ово теоријско "предвиђање" евентуално експериментално потврдило. Главни резултат овог истраживања је "предвиђање" трансфера тополошки заштићеног стања са тополошког изолатора на графен при њиховом међусобног контакту. Резултате овог истраживања др Игор Попов је објавио у Phys. Rev. B 90, 035418.

2.10 Мултислојне хетерогене ТМС структуре

Постоје 2 алотропа ТМС кристала - 2Н и 1Т. Први је стабилан у слободном стању а други није. У сарадњи са израелском експерименталном групом Решефа Тене, Андреја Јењашина из Русије и Готарда Зајферта из Немачке др Игор Попов долази до новог начина за стабилизацију иначе нестабилног 1Т-WS₂ алотропа. Експерименти и теоријски прорачуни су рађени на мултислојним нанотубама. У Хаифи, Израел нанотубе су фабриковане а потом њихова структура одређена трансмисионим електронским микроскопом високе резолуције. DFTB је коришћен при теоријском делу истраживања. Теоријски је израчуната стабилност слободних једнослојних 1Т-MoS₂ нанотуба и одређена енергија напрезања у зависности од радијуса нанотуба. Поврђена је мања стабилност овог алотропа у односу на 2Н-MoS₂ нанотуба. Потом је помоћу молекуларне динамике на бази DFTB утврђено да двослојне 1Т-MoS₂/2Н-MoS₂ нанотубе нису стабилне. Насупрот томе у експерименту нису коришћене чисте MoS₂ нанотубе већ допиране ренијумом. Утврђено је да стабилност допираних 2Н-MoS₂ нанотуба опада са допирањем, у супротности са стабилношћу 1Т-MoS₂ нанотуба чија стабилност расте са допирањем. Разлог томе је попуњавање електронима антивезујућих зона у полупроводном 2Н-MoS₂ док се у металној 1Т-MoS₂ туби попуњавају везивне електронске зоне. Да би се објаснио експеримент израелских сарадника др Игор Попов и др Андреј Јењашин су урадили DFTB прорачуне двослојних 2Н-Mo_{1-x}Re_xS₂/1Т-MoS₂ нанотуба и одредили промену стабилности система са променом концентрације ренијума. Заиста и у овом случају када нема директног допирања 1Т алотропа стабилност расте са повећањем допирања 2Н алотропа. То је објашњено трансфером наелектрисања са 2Н на 1Т нанотубу. Главни резултат овог истраживања је предлог новог начина за стабилизацију 1Т/MoS₂ нанотуба. Резултати овог истраживања су објављени у J. Phys. Chem. C 115, 24586.

2.11 Доминантност ивичних стања у електронском транспорту кроз молибден дисулфидне нанотраке

Користећи DFTB са Гриновим функцијама др Игор Попов је у сарадњи са Езги Ердоган из групе проф. Готарда Зејферта урадио истраживање електронских и транспортних особина већег броја молибден дисулфидних нанотрака, варирајући ширину истих. Узете су две кристалографске оријентације у обзир, нанорибони са zig-zag и armchair ивицама. Показано је да стања дводимензионог MoS₂ кристала остају релативно непромењена у нанотракама овог материјала. Међутим нанотраке садрже ивична стања у забрањеној зони MoS₂ кристала. Обе геометрије, armchair и zig-zag нанотраке су полупроводне а ширина забрањене зоне не зависи од ширине трака. Међутим пасивација "голих" Мо ивица сумором, само на једној или на обе ивице узрокују значајне промене ивичних зона. Нанотраке тако могу бити металне или полупроводне са различитим ширинама забрањене електронске зоне. Како је тешко експериментално урадити

контролисану пасивацију ивица, главни резултат овог истраживања је да су електронске и транспортне особине MoS₂ нанотрака претежно стохастички непредвидиве.

2.12 Екстремно истезање графена и стварање спојева и угљеничних атомских ланаца

У сарадњи са немачком групом проф. Готарда Зајферта Помоћу молекуларне динамике базиране на DFTB др Попов је анализирао структурну еволуцију угљеничних нанотрака при њиховим екстремним истезањима. Истраживање је урађено систематски на великом броју нанотрака различитих ширина све до 5 нанометара, што је за квантне атомске симулације, поготово молекуларну динамику, прилично захтеван посао, али оствариво помоћу DFTB методе. Натезање нанотрака је симулирано малим померањем њихових крајева за 0.01 ангстрем а потом је дозвољена термодинамичка еволуција у трајању од 20 пикосекунди у корацима од 0.25 фемптосекунди, да би се потом опет извело следеће мало истезање. Процес је понављан све док се нанотраке нису распале на два дела. Испитивано је истезање armchair и zig-zag нанотрака (ен. armchair nanoribbon - ANR, zig-zag nanoribbon - ZZNR). Процес цепања ANR изгледа као "парање" тканине, при којем се одвајају појединачни угљенични атомски ланци који остају да својим крајевима повезују два одвојена дела почетне ANR. Овај процес није присутан код истезања ZZNR, при којем долази до једноставног цепања/раздвајања две половине траке, а угљенични ланци се ретко појављују. По завршетку анализе процеса цепања рађени су прорачуни електричне проводности "поцепаних" трака помоћу DFTB методе и Гринових функција. Само су системи са угљеничним ланцима узети у обзир, јер ZZNR код којих нису остали резидуални ланци очигледно нису проводни. Иако су идеални ZZNR метални, док ANR нису, проводност се показала знатно вишом код "поцепаних" ANR. Кандидат је утврдио да је разлог томе што металност ZZNR потиче од стања локализованих на ивицама ових нанотрака, док ANR стања проводе кроз цео кристал. Дакле да би "поцепана" ЗЗНТ била проводна потребно је да угљенични ланац повезује ивице одвојених половина ZZNR. Како је геометрија "поцепаних" трака потпуно стохастична, мала је вероватноћа за повезивање крајева трака и тиме добру електричну проводност "поцепаних" ZZNR. Насупрот томе угљенични ланци у ANR могу да проводе струју независно од тога које делове одвојених половина трака повезују. Главни резултат истраживања је уочавање квалитативне разлике у структурној еволуцији при истезању ANR и ZZNR. Резултати овог истраживања су објављени у Phys. Rev. B 83, 245417 и Phys. Rev. B 83, 041401.

2.13 Течни кристали

Молекули у облику трокраких звезди базирани на језгру хлороглуцинола са три олигобензоатна крака су мезогени који се могу комбиновати и градити течне кристале (ен. columnar liquid crystals). Ови течни кристали су полиморфни на 2 различите просторне скале. На молекуларном нивоу мезогени су веома флексибилни и показују различите склоности ка слагању једних на друге. На супрамолекуларном нивоу полиморфне структуре се граде које одговарају различитим фазама течних кристала: са анизотропним уређењем или меки кристали са изотропним тродимензионим уређењем. Коришћењем молекуларне динамике на бази DFTB-а стабилност и атомска структура ових течних кристала је анализирана. Главни резултат истраживања је одређивање структуре и стабилности течних кристала базираних на звездоликим молекулима. Резултати овог истраживања у сарадњи са немачком експерименталном групом су објављени у Chem. Eur. J. 14, 3562 и Phyl. Mag. Lett. 87, 883.

2.14 Оптичке особине MoS₂ и WS₂ nanotuba

Ефикасна симетријски адаптирана DFTB метода је искоришћена за одређивање оптичких особина MoS₂ и WS₂ нанотуба. Ефикасност методе је омогућила др Игору Попов са сарадницима да одреди оптичке особине великог броја киралних нанотуба чак и оних са великим радијусом. Главни резултати истраживања су следећи. "Предвиђено" је да флуоросценција није могућа у MoS₂ и WS₂ нанотубама. Такође теоријски су потврђени ранији експериментални резултати о црвеном помаку абсорпционих пикова са порастом дијаметра ових нанотуба. Такође је указано да напрезање услед кривине нанотубе узрокује јаку зависност абсорпционог спектра од киралног угла. Резултати овог истраживања су објављени у Phys. Rev. B 76, 233414.

3. Квалитативна оцена научног доприноса

Поред истраживања у већем броју различитих области тежиште истраживања др Игора Попова је на графену и другим дводимензионим материјалима. Ови системи спадају у најпопуларније системе у физици о материјалима последњих неколико година, те је релативно велики број објављених радова кандидата као и изузетно висока цитираност истих показатељ успешне научно-истраживачке делатности др Игора Попова у веома јакој конкуренцији.

Награде и признања за научни рад

Квалитет његовог истраживачког рада је препознао Технички универзитет у Дрездену који му је доделио Prof.-Schwabe награду "за изузетна достигнућа приликом рада на његовој докторској дисертацији Молибден халкогенидне наножице као градивни елементи наноуређаја" (цитат из документа награде). Ова награда се додељује још од 1970. године.

Због кандидатовог значајног доприноса физици халкогенида едитори водећих научних часописа, Nano Letters и Physical Chemistry Chemical Physics, су га позвали да буде рецензент у овим часописима.

Допринос развоју науке у земљи

Као резултат српско-немачке сарадње са групом проф. Милана Дамњановића Игор Попов је објавио добро цитирани рад у врхунском међународном часопису (категорије M21). На позив проф. Дамњановића др Попов је одржао два предавања на Физичком факултету у Београду.

Целокупни научни рад кандидата је у области нових материјала и нанонауке, која је наведена као једна од седам приоритетних области у развоју српске науке у Стратегији научног и технолошког развоја Србије. Зато ће интеграција кандидата у научну заједницу Србије бити од великог значаја за развој науке у земљи.

Предавања на међународним конференцијама и остала предавања

Позван је два пута да одржи предавања на међународним конференцијама: Nanotechnology 2015 и ICSS 2013. Одржао је и свечано предавање поводом добијања Prof. Schwabe награде у Дрездену, као и предавање у Међународној Макс Планк истраживачкој школи (International Max Planck Research School - IMPRS) у Дрездену. Поред тога одржао је предавања из разних области на више међународних конференција, укључујући неколико TMCN/Flatlands симпозијума, SLONANO 2007, Computational Magnetism 2010, EUROMAT 2013.

Менторство

Био је коментор два докторанта на Тринити колеџу у Даблину, Mauro Mantega и Awadhesh Narayana, са којима је објавио рад у врхунском међународном часопису категорије M21. Такође је

усмеравао истраживање докторанткиње Ezgi Erdogan на Техничком универзитету у Дрездену, са којом је објавио 2 рада у врхунским међународним научним часописима категорије M21 и један рад у истакнутом међународном часопису категорије M22.

Руковођење пројектима и потпројектима

Кандидат је имао активно учешће при писању нових пројеката. Прихваћен му је пројекат НРС_13_00740 - *Теоријско истраживање преноса спинске обртне силе из првих принципа* (ен. *Ab initio research of spin transfer torque*) на основу којег су му додељени сати на рачунарском кластеру Келвин у Тринити колеџу.

У оквиру групе Проф. Радоша Гајића из Института за физику у Београду водиће подпројекат на заједничком међународном пројекту са групом Емануела Капелутија. Шифра и назив пројекта су PGR02900 - *Спектроскопије графена и дводимензионих пост-графен материјала* (ен. *Spectroscopies in graphene and 2D post-graphene materials*). Подпројекат има за циљ теоријско одеђивање структурних, електронских и транспортних особина графена, MoS₂ и других дводимензионих материјала.

Кандидат је учествовао у следећим међународним пројектима:

- *Неорганске нанотубе* Немачко-Израелске фондације за научно истраживање и развој
- ДФГ-СБХ, ДФГ-СПП1157 - *Индуковање функционалности услед поларизације на фeroелектричним површинама*
- БМБФ - *Нови мултифероични оксиди - експеримент и теорија*
- ЕУ стипендија ИНТИФ - Неорганске нанотубе и фулерени

Међународна сарадња

Др Игор Попов одржава плодне међународне сарадње са више научно-истраживачких група:

- групом Ђованија Кунибертија из Института за физику материјала и Макс Бергмановог центра за биоматеријале на Техничком универзитету у Дрездену, Немачка
- групом Готарда Зајферта из Института за физичку хемију Техничког универзитета у Дрездену, Немачка
- групом Сибиле Геминг из Хелмхолцовог центра у Розендорфу, Немачка
- групом Дејвида Томанека са Мичигенског универзитета, Сједињене државе
- групом Решефа Тенеа из Вајцмановог института за науку из Хаифе, Израел
- групом Андреја Јењашина из Института за хемију чврстог стања у Јекатеринбургу, Русија

Квалитет научних резултата

Др Игор Попов је објавио **16 радова** у међународним часописима са ISI листе, од чега **12 категорије M21** (врхунски међународни часописи), **2 категорије M22** (истакнути међународни часописи) и **2 категорије M23** (међународни часописи са ISI листе). Кандидат на међународним скуповима има 4 саопштења штампана у изводима (категирије M34) а два пута је био позван да одржи предавања на међународним конференцијама (категирија M32). Такође је одржаосвечано предавање када је добио Проф. Schwabe награду на Техничком универзитету у Дрездену.

Важан аспект за процену квалитета научних резултата кандидата је иквалитет часописа у којима су радови објављени, односно њихов импакт фактор (ИФ). У категорији M21 кандидат је објавио радове у следећим часописима:

- 1 рад у Nano Letters (ИФ=13.592)
- 3 рада у Physical Review Letters (ИФ=7.512)
- 1 рад у Chemistry - A European Journal (ИФ=5.731)
- 1 рад у Journal of Physical Chemistry C (ИФ=4.772)
- 5 радова у Physical Review B (ИФ=3.664)
- 1 рад у Applied Physics Letters (ИФ=3.302)

У категорији M22 кандидат је објавио радове у следећим часописима:

- 1 рад у European Physical Journal B (ИФ=1.345)
- 1 рад у Philosophical Magazine Letters (ИФ=1.262)

У категорији M23 кандидат је објавио радове у следећим часописима:

- 1 рад у European Physical Journal D (ИФ=1.228)
- 1 рад у Physica Status Solidi (ИФ=1.605)

Др Игор Попов је показао висок степен самосталности у свом научном раду. Посебно је томе јак показатељ чињеница да је као први аутор објавио 3 рада у Physical Review Letters и 1 рад у Nano Letters, који спадају у сам врх врхунских научних часописа категорије M21.

Допринос кандидата радовима у којима је он аутор или коаутор се може сумирати на следећи начин:

- у 2 од 3 рада у Physical Review Letters [1,2] је научно истраживање извео потпуно самостално уз повремене консултације са сениорским коауторима а потом је самостално написао радове уз а постериори сугестије коаутора.
- и трећи Physical Review Letters [3] је написао самостално али уз тесну сарадњу са осталим коауторима при извођењу истраживачког рада.
- 5 радова [3,5,10,12,15] који су укључени у докторску дисертацију кандидата, Игор Попов је написао самостално уз консултације са старијим члановима групе.
- комплетно истраживање, од идеје до реализације, а потом и писање рада у Nano Letters [5] је извео самостално уз а постериори сугестије коаутора за допуну написаног рада.

- у радовима [6,7,14] је имао тесну сарању са експерименталним групама. У њима је кандидат извршио одговарајуће прорачуне и симулације које су дале објашњења или "предвиђања" експерименталних резултата.
- у радовима са Езги Ердоган [8,11,13] као првим аутором кандидат је интензивно усмеравао истраживачке кораке поменуте Ердоган и дао значајан допринос при писању наведених радова.
- кандидат је на основу своје идеје покренуо истраживање објављено у раду [4] са 2 докторанта у групи у Тринити колеџу. Кандидат је написао рад пошто је интензивно усмеравао истраживање та два докторанта на реализацији истог.
- у радовима [9,16] кандидатов допринос је у прорачуну одговарајућих семиемпиријских параметара и коресподентних фајлова без којих истраживање не би било могуће.

Укупан **импакт фактор** побројаних радова је **73.693**.

Према Web of Science кандидатови научни радови су **цитирани тачно 300 пута**.

4. Квантитативна оцена научно-истраживачког рада

Пошто се кандидат др Игор Попов након повратка из иностранства бира директно у звање виши научни сарадник, приказани су минимални услови за избор у звање научни сарадник и виши научни сарадник, као и збирни услов за оба звања.

Звање		Неопходно	Остварено
Научни сарадник	Укупно	16	
	$M_{10}+M_{20}+M_{31}+M_{32}+M_{33}+M_{41}+M_{42} \geq$	10	
	$M_{11}+M_{12}+M_{21}+M_{22}+M_{23}+M_{24} \geq$	5	
Виши научни сарадник	Укупно	48	120
	$M_{10}+M_{20}+M_{31}+M_{32}+M_{33}+M_{41}+M_{42} +M_{51} \geq$	40	115
	$M_{11}+M_{12}+M_{21}+M_{22}+M_{23}+M_{24} +M_{31}+M_{32}+M_{41}+M_{42} \geq$	28	115
Научни саветник	Укупно	65	
	$M_{10}+M_{20}+M_{31}+M_{32}+M_{33}+M_{41}+M_{42}+M_{51} \geq$	50	
	$M_{11}+M_{12}+M_{21}+M_{22}+M_{23}+M_{24}+M_{31}+M_{32} \geq$	35	

По категоријама:

Категорија	М бодова по раду	Број радова	Укупно М бодова
M21	8	12	96
M22	5	2	10
M23	3	2	6
M34	0.5	4	2
M71	6	1	6
Укупно			120

Поређење минималних услова са оствареним резултатима кандидата:

Збирно за оба звања	Услов	Остварени резултат
Укупно	64	120
M10+M20+M31+M32+M33+M41+M42	50	115
M10+M20+M31+M32+M33+M41+M42+M51	50	115
M11+M12+M21+M22+M23+M24	33	112
M11+M12+M21+M22+M23+M24+M31+M32+M41+M42	33	115

Кандидат не само да има неопходан број поена за добијање звања виши научни сарадник, већ број остварених поена значајно премашује збир поена неопходних за добијање звања научни сарадник и виши научни сарадник.

5. Закључак

Имајући у виду велику разноврсност, изузетан квалитет и оригиналност научних резултата добијених из досадашњег рада др Игора Попова, његово значајно искуство у организацији научно-истраживачког рада и одржавања међународних сарадњи, као и броја објављених радова и њихову веома високу збирну цитираност, мишљења смо да је кандидат достигао веома високу истраживачку зрелост и научну компетентност. Кандидат је значајно премашио све збирне квантитативне и квалитативне критеријуме за избор у звање виши научни сарадник који су прописани Правилником Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије. Такође треба напоменути да је кандидат провео 4 године и 8 месеци на постдокторској позицији на Тринити колеџу у Даблину, која је аналогна звању научног сарадника у нашем научно-истраживачком систему.

Из наведеног нам је изузетно задовољство да предложимо Научном већу Института за физику да усвоји извештај и изабере др Игора Попова у звање виши научни сарадник.

У Београду, 23. октобра, 2015

Чланови комисије

1. Др Радош Гајић
научни саветник, Институт за физику

2. Др Ненад Вукмировић
виши научни сарадник, Институт за физику

3. Др Иванка Милошевић
редовни професор, Физички факултет

A. Додатак - списак радова са бројем цитата

M 21:

1. I.Popov, G.Seifert, D.Tomanek

Designing electrical contacts to MoS₂ monolayers: a computational study

Phys. Rev. Lett. **108**, 156802 (2012)

бр.цитата: 101

2. I.Popov, N.Baadji, S.Sanvito

Magnetism and antiferroelectricity in MgB₆

Phys. Rev. Lett. **108**, 107205 (2012)

бр. цитата: 5

3. I.Popov, T.Yang, S.Berber, G.Seifert, D.Tomanek

Unique structural and transport properties of molybdenum chalcogenide nanowires

Phys. Rev. Lett. **99**, 085503 (2007)

бр. цитата: 15

4. I. Popov, M. Mantega, A. Narayan, S. Sanvito

Proximity-induced topological state in graphene

Physical Review B **90**, 035418 (2014)

бр. цитата: 0

5. I.Popov, S.Gemming, S.Okano, N.Ranjan, G.Seifert

Electromechanical switch based on Mo₆S₆ nanowires

Nano Lett. **8**, 4093-4097 (2008)

бр. цитата: 16

6. M.Lehmann, M.Jahr, B.Donnio, R.Graf, S.Gemming and I.Popov

Star-shaped oligobenzoates: Non-conventional mesogens forming columnar helical mesophases

Chemistry - A European Journal **14**, 3562-3576 (2008)

бр. цитата: 44

7. A.Enyashin, L.Yadgarov, L.Houben, I.Popov, M.Weidenbach, R.Tenne, M. Bar-Sadan, G.Seifert

New route for stabilization of 1T-WS₂ and MoS₂ phases

J. Phys. Chem. C **115**, 24586 (2011)

бр. цитата: 38

8. E.Erdogan, I.Popov, C.G.Rocha, G.Cuniberti, S.Roche, G.Seifert

Engineering carbon chains from mechanically stretched graphene-based materials

Phys. Rev. B **83**, 041401 (2011)

бр. цитата: 27

9. I.Milosevic, B.Nikolic, E.Dobardzic, M.Damnjanovic, I.Popov, G.Seifert

Electronic properties and optical spectra of MoS₂ And WS₂ nanotubes

Phys. Rev. B **76**, 233414 (2007)

бр. цитата: 14

10. I.Popov, S.Gemming, G.Seifert

Structural and electronic properties of Mo₆S₈ clusters deposited on a Au(111) surface investigated with density functional theory

Phys. Rev. B **75**, 245436 (2007)

бр. цитата: 6

11. E.Erdogan, I.Popov, G.Seifert

Robust electronic and transport properties of graphene break nanojunctions

Phys. Rev. B **83**, 245417 (2011)

бр. цитата: 5

12. I.Popov, A.Pecchia, S.Okano, N.Ranjan, A.Di Carlo, G.Seifert

Electronic and transport properties of contacts between Mo₆S₆ nanowires and gold electrodes

Appl. Phys. Lett. **93**, 083115(2011)

бр. цитата: 5

M22:

13. E.Erdogan, I.Popov, A.N.Enyashin, G.Seifert

Transport properties of MoS₂ nanoribbons: edge priority

Eur. Phys. J. B **85**, 33 (2012)

бр. цитата: 16

14. S.Gemming, I.Popov, M.Lehmann

Polymorphism in liquid crystals from star-shaped mesogens

Phil. Mag. Lett. **87**, 883 - 891 (2007)

бр. цитата: 4

M23:

15. I.Popov, T.Kunze, S.Gemming, G.Seifert

Self-assembly of Mo₆S₈ clusters on the Au(111) surface

Eur. Phys. J. D **45**, 439 - 446

бр. цитата: 3

16. A.Enyashin, I.Popov, G.Seifert

Stability and electronic properties of rhenium disulfide nanotubes

Phys. Stat. Sol. B **246**, 114 - 118 (2009)

бр. цитата: 1