

НАУЧНОМ ВЕЋУ ИНСТИТУТА ЗА ФИЗИКУ У БЕОГРАДУ

ПРЕДМЕТ:

ИЗВЕШТАЈ КОМИСИЈЕ ЗА ИЗБОР ДР СОЊЕ АШКРАБИЋ У ЗВАЊЕ НАУЧНИ САРАДНИК

На седници Научног већа Института за физику, одржаној 18. марта 2014. године, изабрани смо у Комисију за избор др Соње Ашкрабић у звање научни сарадник. Прегледом материјала који нам је достављен, као и на основу личног познавања кандидата и увида у њен рад, Научном већу Института за физику подносимо следећи извештај:

Стручно – биографски подаци

Соња Ашкрабић је рођена 18. јануара 1983. године у Сарајеву, у Босни и Херцеговини. Завршила је Математичку гимназију у Београду. Дипломирала је на Физичком факултету у Београду, на смеру Теоријска и експериментална физика 2006. године, са просечном оценом 9,81. Тема дипломског рада била је: “Карактеризација поликристалног и нанокристалног праха CeO_2 Рамановом спектроскопијом”. Завршила је једногодишње мастер студије 2007. године.

Од јануара 2007. године је запослена на Институту за физику, у Центру за физику чврстог стања и нове материјале као истраживач-приправник. Одлуком Научног већа Института за физику стекла је звање истраживач-сарадник Института за физику у јуну 2009.

Докторску дисертацију под називом: “Фонони и дефектна стања у оксидним наноматеријалима”, урађену под руководством др Зоране Дохчевић - Митровић, одбранила је 12. марта 2014. године на Физичком факултету Универзитета у Београду.

Др Соња Ашкрабић је аутор или коаутор 13 радова објављених у међународним часописима.

Преглед научне активности

Истраживачки рад Соње Ашкрабић усмерен је ка проучавању вибрацијских, електронских и структурних својстава оксидних наноматеријала. Испитивани системи обухватају нанопрахове чистог церијум диоксида (CeO_2) и CeO_2 допираног елементима ретких земаља (Gd, Y, Nd, Pr), нанопрахове титанијум диоксида (TiO_2) и TiO_2 допираног лантаном (La) и ванадијумом (V), као и нанослојева цинк селенида (ZnSe).

Истраживање је усмерено на испитивање особина фонона у оксидним наноматеријалима и њихових промена које се јављају због присуства дефеката и просторног ограничења (услед смањења величине честице), затим испитивање појаве нових акустичких вибрација које представљају вибрације еластичних сферних наночестица и проучавање фонон-фонон интеракција у нанокристалима. Други део истраживања се односио на испитивање електронских стања унутар енергијског процепца нанокристалног церијум диоксида, која настају као последица локализације електрона на кисеоничним ваканцијама. Овакви дефекти се називају F центри и први пут су експериментално регистровани у нанокристалном CeO_2 у оквиру датог истраживања. Присуство F - центара је одговорно за појаву феромагнетизма на собној температури и потенцијалну примену материјала у спинтроници, због чега су ови дефекти интересантни за проучавање. Експерименталне методе примењене у раду, а које су коришћене за проучавање вибрационих и електронских особина чистих и допираних наноматеријала су Раманова спектроскопија, фотолуминесцентна спектроскопија, рентгенска дифракција, микроскопија на бази атомских сила (Atomic Force Microscopy - AFM) и електронска парамагнетна резонанца (ЕПР). За анализу резултата Раманове спектроскопије коришћени су модел еластичне сфере и модел фононског ограничења. Метод фотолуминесцентне спектроскопије је коришћен и за испитивање дефектних стања и електронске структуре нестехиометријских оксидних наноматеријала.

У оквиру описане научне активности Соња Ашкрабић има 13 радова објављених у међународним часописима, од чега 7 радова у водећим међународним часописима (M21 и M22).

Раманово расејање на акустичким вибрацијама нанокристалног CeO_2

- R. Kostić, S. Aškrabić, Z. Dohčević-Mitrović, and Z. V. Popović. "Low-Frequency Raman Scattering from CeO_2 Nanoparticles." *Applied Physics A* 90 (2008): 679-83.
- S. Aškrabić, R. Kostić, Z. Dohčević-Mitrović, and Z. V. Popović. "Raman Scattering from Low Frequency Phonons Confined in CeO_2 Nanoparticles." *Journal of Physics: Conference Series* 92 (2007): 012042.

У Рамановим спектрима нанокристала CeO_2 , у региону ниских учестаности ($\omega < 50 \text{cm}^{-1}$), је забележена појава нових модова. Појава ових модова је последица локализације акустичких фонона услед смањења димензије честица, приликом чега се спрежу дисперзионе гране које одговарају акустичним фононима у монокристалу. За анализу Раманових модова на ниским фреквенцијама примењен је модел еластичне сфере, где се нискофононске вибрације нанокристала могу апроксимирати еластичним таласима чврсте сфере. Применом модела на експериментално добијене вредности енергија фонона који су регистровани у Рамановом спектру, одређена је вредност средње димензије честице у датом нанопраху.

Раманово расејање на акустичким вибрацијама нанокристалног TiO₂ и La-допираног TiO₂

- M. Šćepanović, S. Aškrabić, M. Grujić-Brojčin, A. Golubović, Z. Dohčević-Mitrović, A. Kremenović, and Z. V. Popović. "Low-Frequency Raman Spectroscopy of Pure and La-Doped TiO₂ Nanopowders Synthesized by Sol-Gel Method". *Acta Physica Polonica A* 116 (2009): 99-102.

Зависност структурних и морфолошких особина нанопрахова TiO₂ од услова синтезе и садржаја La³⁺ јона испитивана је Рамановом спектроскопијом. Веома интензивни модови уочени у Рамановим спектрима ових нанопрахова приписани су анатас фази. Ниско-фреквентне акустичке вибрација у Рамановим спектрима су анализиране моделом еластичне сфере и датом анализом је одређена расподела величине честица у TiO₂ наноправима. Процењена расподела је искоришћена за прорачун интензитета најинтензивнијег E_g Рамановог мода у анатас наноправима применом модела фононског ограничења. Прорачунати положај и асиметрично ширење одлично се подударају са карактеристикама E_g мода добијеним на основу измерених Раманових спектра TiO₂ нанопрахова.

Утицај напрезања и величине честице на оптичке фононе у нанокристалном CeO₂

- S. Aškrabić, Z. Dohčević-Mitrović, A. Kremenović, N. Lazarević, V. Kahlenberg, and Z. V. Popović. "Oxygen Vacancy-Induced Microstructural Changes of Annealed CeO_{2-x} Nanocrystals." *Journal of Raman Spectroscopy* 43 (2012): 76-81.
- Z. V. Popović, Z. Dohčević-Mitrović, M. Šćepanović, M. Grujić-Brojčin, and S. Aškrabić. "Raman Scattering on Nanomaterials and Nanostructures." *Annalen der Physik* 523 (2011): 62-74.

Кисеоничне ваканције су карактеристичне за све оксидне наноматеријале због повећаног односа површина/запремина при смањењу димензије честица до реда величине нанометра, али у нанокристалима CeO₂ су оне посебно изражене. Зависност микронапрезања нанокристалног CeO₂ од температуре и разграничење ефекта микронапрезања од раста честица са повећањем температуре одгревања анализиране су коришћењем резултата рентгенске дифракције и Раманове спектроскопије. Концентрација дефектних стања је праћена преко интензитета модова који одговарају дефектним стањима у Рамановом спектру. Закључено је да је при повећању температуре одгревања доминантан ефекат смањења микронапрезања и да одгревање CeO₂ на средњим температурама (400 – 500) °C доводи до значајног уноса кисеоника у решетку и опадања концентрације кисеоничних ваканција, тј. побољшања стехиометрије узорака.

Фонон – фонон интеракције у нанокристалном CeO₂ допираним Gd

- S. Aškrabić, Z. D. Dohčević-Mitrović, M. Radović, M. Šćepanović, and Z. V. Popović. "Phonon-Phonon Interactions in Ce_{0.85}Gd_{0.15}O_{2-δ} Nanocrystals Studied by Raman Spectroscopy." *Journal of Raman Spectroscopy* 40 (2009): 650-55.

Преко промена енергије и ширине Раман мода при загревању до виших температура (≤ 800 °C) и хлађењу до собне температуре анализирани су: фонон-фонон интеракције и њихова повезаност са променом средње димензије зрна нанокристала, јачином фононског ограничења, променом напрезања и концентрацијом кисеоничних ваканција. Коришћењем анхармонијског модела који су предложили Клеменс, Харо и Балкански, анализирана је промена положаја и ширине Раман мода под утицајем трофононских и четворофононских процеса у Gd-допираним CeO₂ нанопраховима. Утврђено је да на температурама испод 300 °C доминирају четворофононски процеси и ефекти локализације услед нанометарских димензија честица имају мање утицаја на Раманов мод него анхармонијски ефекти. На високим температурама, изнад 600 °C поново су доминантни трофононски процеси што говори о томе да је средња величина честица довољно порасла да би оне имале слично анхармонијско понашање као запремински кристал. Понашање два дефектна мода, повезана са присуством уведених и својствених кисеоничних ваканција праћено је током промене температуре система. Утврђено је да понашање интензитета ових модова иде у прилог формирању компликованијих дефектних домена који садрже уређене ваканције или већом покретљивошћу ваканција на високим температурама.

Вибрациона својства чистог и допираниг нанокристалног TiO₂ анатаса

- Golubović, M. Šćepanović, A. Kremenović, S. Aškrabić, V. Berec, Z. Dohčević-Mitrović, and Z. V. Popović. "Raman Study of the Variation in Anatase Structure of TiO₂ Nanopowders Due to the Changes of Sol-Gel Synthesis Conditions." *Journal of Sol-Gel Science and Technology* 49 (2008): 311-19.
- M. Šćepanović, S. Aškrabić, V. Berec, A. Golubović, Z. Dohčević-Mitrović, A. Kremenović, and Z. V. Popović. "Characterization of La-Doped TiO₂ Nanopowders by Raman Spectroscopy". *Acta Physica Polonica A* 115 (2009): 771-74.
- M. Šćepanović, S. Aškrabić, M. Grujić-Brojčić, A. Golubović, Z. Dohčević-Mitrović, B. Matović, and Z. V. Popović. "Raman Study of Vanadium-Doped Titania Nanopowders Synthesized by Sol-Gel Method." *International Journal of Modern Physics B* 24 (2010): 667-75.

Рамановом спектроскопијом је проучавано понашање оптичких модова у чистом TiO₂ и TiO₂ допираним La и V. У чистом TiO₂ су на основу промена

Рамановог оптичког E_g мода услед просторног ограничења и модова који одговарају брукитној фази, процењени средња величина наночестица и удео брукитне фазе у праховима. Зависност структурних и морфолошких особина нанопрахова TiO_2 од услова синтезе и садржаја La^{3+} јона испитивана је Рамановом спектроскопијом. Установљено је да присуство лантана стабилише анатас структуру при загревању до 800°C у La – допираном TiO_2 . Међу нанопраховима TiO_2 допираног V највеће промене у понашању оптичког E_g мода регистроване су у узорку са најбржим градијентом промене температуре приликом калцинације и најдужем трајању калцинације.

F – центри у нанокристалним праховима CeO_2

- Aškračić S Dohčević-Mitrović Z Araujo V Ionita G De Lima M and Cantarero A: "F centre luminescence in nanocrystalline CeO_2 ." *J.Phys. D : Appl. Phys.* 46 (2013): 495306.

Кисеоничне ваканције у оксидним наноматеријалима могу и не морају да заробе један од два или оба електрона која заостају након што јон кисеоника напусти кристалну решетку, због чега могу представљати тзв. двоструко наелектрисане (F^{++}), једноструко наелектрисане (F^+) или неутралне (F^0) центре. Од типа ваканција које настају у оксидним наноматеријалима, унутар енергетског процепа нанокристала, зависи формирање различитих дефектних нивоа тј. стања. Коришћењем фотолуминесцентне (ФЛ) спектроскопије испитиване су енергије дефектних стања различитих F центара у нанокристалним CeO_2 синтетисаним путем две хемијске методе, као и процеси који доводе до радијативне рекомбинације на собној и ниским температурама (до 20 K). Енергијска побуда система је остварена ласерским линијама Ar^+ ласера које се налазе у видљивом делу спектра са таласним дужинама: 458 nm, 488 nm, 514 nm, чија је енергија побуде мања од вредности енергетског процепа за CeO_2 ($E_g = 3.8 \text{ eV}$). За побуду је такође коришћена и ултраљубичаста линија (325 nm), чија је енергија приближно једнака E_g , са циљем да се детаљно испитају стања унутар забрањене зоне. Показано је да електронска стања која учествују у процесима апсорпције и емисије светлости представљају основна и побуђена стања поменутих F центара. Доминантне емисионе траке у ФЛ спектрима су центриране око положаја 2.1 eV и 2.4 - 2.5 eV. ФЛ трака на положају $\sim 2.4 \text{ eV}$ приписана је прелазу из побуђеног у основно стање F^+ центра (ваканција са једним заробљеним електроном), а трака на положају $\sim 2.1 \text{ eV}$ је приписана прелазу између побуђеног и основног стања F^0 центра (ваканција са два заробљена електрона). Показано је да F^+ центри доминирају у узорку синтетисаном самопропагирајућом методом, а да F^0 центри доминирају у узорку синтетисаном методом преципитације. ФЛ трака центрирана око 2.9 – 3.0 eV јавља се у спектрима оба узорка и приписана је прелазу између стања $\text{F}^{++} \rightarrow 4f^1$. Додатни ЕПР сигнали регистровани само у спектру узорка синтетисаног самопропагирајућом методом се могу приписати F^+ центрима. Закључено је да различите методе синтезе, самопропагирајућа синтеза и преципитација, утичу на формирање различитих врста дефектних центара кисеоничних ваканција.

Феромагнетизам у нанокристалном CeO₂ и CeO₂ допираним Pr

- Novica Paunović, Zorana Dohčević-Mitrović, Rares Scurtu, Sonja Askračić, Marija Prekajski, Branko Matović, and Zoran V. Popović. "Suppression of Inherent Ferromagnetism in Pr-Doped CeO₂ Nanocrystals." *Nanoscale* 4 (2012): 5469-76.

У случају Pr-допираних CeO₂ нанокристала, магнетним мерењима је установљено да узорци показују феромагнетизам на собној температури, при чему Pr -допирање доводи до уништења феромагнетизма. Истраживања су показала да се Pr уграђује супституционално у целом испитиваном опсегу, делимично у облику Pr⁴⁺ а делимично у облику Pr³⁺ јона, при чему релативни удео Pr³⁺ јона расте са Pr допирањем. Истраживања су показала да при Pr допирању садржај кисеоничних ваканција расте. Да би се објаснило опадање сатурационе магнетизације са порастом концентрације јона предложено је објашњење базирано на механизму измене преко F центара. Недопирани нанокристали CeO₂ на собној температури испољавају феромагнетизам који се успоставља посредством кисеоничних ваканција са једним заробљеним електроном (F⁺ центара). Присуство Pr³⁺ јона у танком површинском слоју нанокристала, где су кисеоничне ваканције углавном смештене, доводи до драстичне деградације феромагнетизма. До овога долази услед формирања комплекса као што су Pr³⁺-V_O-Ce³⁺ или Pr³⁺-V_O-Pr³⁺, локализације електрона на ваканцијама и креирања кисеоничних ваканција без заробљених електрона (F⁰ центара), или са два заробљена електрона (F²⁺ центара), које не доприносе феромагнетизму. Формирање F²⁺ и F⁰ центара смањује концентрацију F⁺ центара и нарушава феромагнетизам у Pr-допираним CeO₂ узорцима.

Вибрациона и оптичка својства танких слојева ZnSe

- D. Nesheva, M. J. Šćepanović, S. Aškračić, Z. Levi, I. Bineva, and Z.V. Popović. "Raman Scattering from ZnSe Nanolayers ". *Acta Physica Polonica A* 116 (2009): 75-77.
- D. Nesheva, M. J. Scepanovic, Z. Levi, S. M. Askračić, Z. Aneva, A. Petrova, and Z. V. Popovic. "Structural Characterization and Photoluminescence of Znse Nanolayers." *Journal of Optoelectronics and Advanced Materials* 11 (2009): 1351-54.

У Рамановим спектрима танких и ултра танких ZnSe слојева установљено је различито резонантно понашање. Спектри измерени $\lambda=442$ nm линијом HeCd ласера показују да је ова енергија блиска оптичком процепу нанокристалита у најтањим слојевима и вишеслојним структурама ZnSe, што указује да је величина кристалита у овим слојевима реда величине 10 nm. Кристаличност ZnSe филмова може се побољшати озрачивањем узорака ласерским снопом велике снаге (≥ 300 mW). Фотолуминесцентна мерења такође су потврдила да је у слојевима тањим од 100 nm

присутна мешавина аморфне и кристалне фазе ZnSe, као и да удео кристалне фазе опада са смањењем дебљине слоја.

Елементи за квалитативну оцену научног доприноса (за избор у звање научни сарадник)

1. Показатељи успеха у научном раду

1.1. Уводна предавања на конференцијама и друга предавања по позиву

- Предавање по позиву у Друштву за керамичке материјале Србије

1.2. Награде и признања за научни рад

- Награда за најбоље студентско предавање на конференцији **1st Conference of the Serbian Ceramic Society (1CSCS-2011)**

2. Ангажованост у развоју услова за научни рад, образовању и формирању научних кадрова

2.1. Допринос формирању научних кадрова у земљи:

Обука мастер студената и истраживача-приправника Института за физику за примену метода Раманове и фотолуминесцентне спектроскопије у анализи материјала, као и за коришћење метода синтезе нанокристалних прахова.

3. Организација научног рада

3.1 Рукводење пројектима, потпројектима и задацима

Кандидат је учествовала-учествује у следећим пројектима основних истраживања Министарства просвете, науке и технолошког развоја:

- Од 2007. до 2010. године пројекат „*Физика нискодимензионих и нанометарских структура и материјала*“, под руководством проф. др Зорана Поповића.
- Од 2011. године пројекат „*Физика наноструктурних оксидних материјала и јако корелисаних система*“ (ON171032), под руководством др Зоране Дохчевић-Митровић.
- Од 2011. године пројекат „*Наноструктурни мултифункционални материјали и нанокмпозити*“ (П45018), под руководством проф. др Зорана Поповића.

као и у међународним пројектима:

- 2006-2009. године пројекат „*Centre of Excellence for Optical Spectroscopy Applications in Physics, Material Science and Environmental Protection-OPSA*” (у оквиру ОП6 Програма), под руководством проф. др Зорана Поповића.

- 2009-2012. године пројекат SCOPES: „*Nano-crystalline porous anatase TiO₂ and application to the human environment: the synthesis and testing of transport properties*”, Swiss National Science Foundation, под руководством др Зоране Дохчевић-Митровић.
- 2010-2012. године билатерални пројекат са Шпанијом: „*Nano-structured Oxide-Based Semiconducting Materials for Environmental Technology*”, под руководством проф. др Зорана Поповића
- Од 2013. године билатерални пројекат са Италијом: „*Innovative oxide nanostructures for water purification*”, под руководством др Зоране Дохчевић-Митровић.

4. Квалитет научних резултата

Кандидат је у свом научном раду објавила укупно 12 радова у међународним часописима са ISI листе, и то:

- M21: 6 радова
- M22: 1 рад
- M23: 5 радова.

Укупан импакт фактор радова кандидата је 22.8.

Према Science Citation Index-у, научни радови које је др Соња Ашкрабић објавила до сада су цитирани 107 пута у међународним часописима, а 85 пута не рачунајући аутоцитате свих аутора.

Остварени резултати у периоду пре избора

| Категорија | М бодова по раду | Број радова | Укупно М бодова |
|------------|------------------|-------------|-----------------|
| M21 | 8 | 6 | 48 |
| M22 | 5 | 1 | 5 |
| M23 | 3 | 5 | 15 |
| M34 | 0.5 | 3 | 1.5 |
| M71 | 6 | 1 | 6 |

Поређење са минималним квантитативним условима за избор у звање научни сарадник

| Минималан број М бодова | | Остварено |
|-----------------------------|----|-----------|
| Укупно | 16 | 75.5 |
| M10+M20+M31+M32+M33+M41+M42 | 10 | 68 |
| M11+M12+M21+M22+M23+M24 | 5 | 68 |

ЗАКЉУЧАК

Имајући у виду квалитет резултата добијених из докторске дисертације “Фонони и дефектна стања у оксидним наноматеријалима”, као и досадашњи рад др Соње Ашкрабић и број објављених радова који знатно премашује минимални квантитативни услов за избор у звање научни сарадник, предлажемо Научном већу Института за физику да усвоји извештај и подржи избор др Соње Ашкрабић у звање научни сарадник.

У Београду, 20.3.2014. године

Чланови комисије:

Др Маја Шћепановић,
Научни саветник, Институт за физику, Београд

Др Зорана Дохчевић-Митровић,
Научни саветник, Институт за физику, Београд

Проф. др Стеван Стојадиновић,
Ванредни професор, Физички факултет, Београд