

**Naučnom Veću  
Instituta za fiziku  
Pregrevica 118  
11080 Beograd**

**PREDMET: Izveštaj Komisije za reizbor dr Mirjane Grujić-Brojčin  
u zvanje viši naučni saradnik**

Na sednici Naučnog saveta Instituta za fiziku u Beogradu, održanoj 29.04.2014. godine, imenovani smo u komisiju za reizbor dr Mirjane Grujić-Brojčin u zvanje viši naučni saradnik. Pregledom materijala koji nam je dostavljen, kao i na osnovu ličnog poznavanja kandidata i uvida u njen rad, Naučnom veću Instituta za fiziku u Beogradu podnosimo sledeći:

## **I Z V E Š T A J**

### **OSNOVNI BIOGRAFSKI PODACI**

Dr Mirjana Grujić-Brojčin, rođena je 1970. godine u Kragujevcu, gde je završila Osnovnu školu i Gimnaziju. Diplomirala je 1996. godine na Odseku za fizičku elektroniku, Smer za elektrotehničke materijale i tehnologije Elektrotehničkog fakulteta u Beogradu. Odbanila je magistarsku tezu "Proračun molekularnih vibracija klastera jednoslojnih nanotuba" na Elektrotehničkom fakultetu u Beogradu, smer Elektrotehnički materijali i tehnologije. Doktorski rad pod naslovom "Optička spektroskopija oksidnih nanoprahova" odbranila je na Elektrotehničkom fakultetu u Beogradu 16. oktobra 2008. godine.

Od 16. decembra 1996. godine zaposlena je u Centru za fiziku čvrstog stanja i nove materijale Instituta za fiziku.

U zvanje istraživač saradnik izabrana je 24. aprila 2001. godine.

U zvanje viši naučni saradnik izabrana je odlukom MNTR Republike Srbije od 14. oktobra 2009. godine.

### **NAUČNO ISTRAŽIVAČKA AKTIVNOST**

Naučno istraživačka aktivnost dr Mirjane Grujić-Brojčin vezana je za istraživanja u oblasti fizike čvrstog stanja, a od 2009. godine odvijala se u nekoliko pravaca:

1. Karakterizacija nanostrukturnih materijala, posebno modelovanje optičkih spektara oksidnih nanoprahova
2. Modelovanje optičkih i poroznih svojstava nanostrukturnih oksida za fotokatalitičke primene
3. Primena metoda optičke spektroskopije u izučavanju i zaštiti kulturnih dobara

#### **1. Karakterizacija nanostrukturnih materijala, posebno modelovanje optičkih spektara oksidnih nanoprahova**

Od 2004. godine dr Mirjana Grujić-Brojčin aktivno učestvuje u istraživanju nanostrukturnih materijala, posebno u razvoju i primeni numeričkih modela za analizu infracrvenih (IC) i Ramanovih spektara, kao i modelovanju fotoluminescentnih (FL) spektara, što omogućava

sistematsko proučavanje strukturnih i elektronskih osobina velikog broja različitih nanomaterijala, u cilju razumevanja uticaja uslova sinteze na njihove željene karakteristike i potencijalnu primenu. Dr Mirjana Grujić-Brojčin razvila je numeričke modele i originalne softvere, koji su uspešno primenjeni na široku klasu nanostrukturnih materijala (nanoprahovi, kvantne tačke, kvantne žice, tanke slojevi i višeslojne strukture). U okviru ove oblasti ispitivani su TiO<sub>2</sub>, CeO<sub>2</sub> i ZnO nanoprahovi, zatim SiO<sub>x</sub> tanki filmovi, multislojevi ZnSe-SiO<sub>x</sub> i tanki ZnSe filmovi.

Od 2009. godine, nastavljajući dalji razvoj i primenu numeričkih modela, dr Mirjana Grujić-Brojčin je učestvovala u proučavanju čistih i dopiranih TiO<sub>2</sub> nanoprahova sintetisanih sol-gel metodom i ZnO nanoprahova dobijenih mehaničkom aktivacijom komercijalnog ZnO praha, kao i ZnSe nanoslojeva.

### 1.1. Karakterizacija TiO<sub>2</sub> nanoprahova sintetisanih sol-gel metodom

Dr Mirjana Grujić-Brojčin je primenom modela fononskog ograničenja (MFO) sproveda detaljnu analizu ponašanja najintenzivnijeg Ramanovog  $E_g$  moda anatas faze u nanoprahovima titanijum dioksida sintetisanog sol-gel metodom. Na taj način je utvrđeno da je frekventni pomeraj i širenje  $E_g$  Raman moda posledica uticaja fononskog ograničenja, usled nanometarskih dimenzija kristalita, ali i prisustva brukitne faze u uzorcima. Ova metoda karakterizacije omogućila je elementarnu identifikaciju faza i procenu veličine nanokristalita i sadržaja brukitne faze u uzorcima u zavisnosti od uslova sinteze, čime se došlo do optimizacije parametara procesa sinteze, kao što su pH vrednost sredine prilikom prevođenja u gel, trajanje „starenja” gela, kao i temperatura, brzina i vreme kalcinacije. Pored toga, dr Mirjana Grujić-Brojčin je primenom MFO analizirala ponašanje  $E_g$  Raman moda na povišenim temperaturama u uzorcima titanijum dioksida dopiranih lantanom. Ovo je potvrdilo da dopiranje TiO<sub>2</sub> La<sup>3+</sup> jonima znatno poboljšava faznu i nanostrukturnu stabilnost TiO<sub>2</sub> prahova na visokim temperaturama, čime se povećava efikasnost konverzije svetlosti.

Dr Mirjana Grujić-Brojčin je takođe pokazala da se MFO u kombinaciji sa modelom elastičnog kontinuuma koji opisuje akustičke fononske modove registrovane u nisko-frekventnom opsegu (<40 cm<sup>-1</sup>) može iskoristiti za određivanje raspodele veličine nanočestica u nanoprahovima TiO<sub>2</sub> dopiranim La. Na ovaj način je pokazano i kako izbor koncentracije dopanta utiče na dobijene osobine nanočestica anatas. Iz ove oblasti objavljena su 2 rada kategorije M22 i M23:

- i M. J. Šćepanović, M. Grujić-Brojčin, Z. D. Dohčević-Mitrović, Z. V. Popović  
"Characterization of Anatase TiO<sub>2</sub> Nanopowder by Variable-Temperature Raman Spectroscopy"  
*Science of Sintering*, 41 (2009) 67-73  
M22
- ii 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 TiO<sub>2</sub> Nanopowders Synthesized by Sol-Gel Method"  
*Acta Physica Polonica A* 116 (1) (2009) 94-102  
M23

Dr Mirjana Grujić-Brojčin učestvovala je u ispitivanju nanoprahova titanijum dioksida, čistog i dopiranog vanadijumom, koji su takođe proizvedeni metodom sol-gel sinteze, gde proučavan uticaj uslova kalcinacije (temperature i trajanja) na njihove strukturne varijacije. Primenom Ramanove spektroskopije ustanovila je da temperatura i trajanje procesa kalcinacije imaju veliki uticaj na ponašanje najintenzivnijeg Ramanovog  $E_g$  moda, dok na nedopirane uzorke skoro da nemaju uticaj. Ovi rezultati publikovani su u radu:

M. Šćepanović, S. Aškračić, M. Grujić-Brojčin, 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(6-7) (2010) 667-675  
M23

Karakterizacija nanoprahova metodom spektroskopske elipsometije, kao i numeričko modelovanje eksperimentalnih rezultata bili su takođe predmet istraživanja dr Mirjane Grujić Brojčin.

Dr Grujić-Brojčin je primenom spektroskopske elipsometrije određivala dielektričnu funkciju laserski sintetisanih TiO<sub>2</sub> nanoprahova u energetsom opsegu od 1,5 do 6 eV na sobnoj temperaturi. Usaglašavanjem drugog izvoda eksperimentalno dobijenih spektara sa odgovarajućim analitičkim oblikom ovih funkcija, odredila je energije koje odgovaraju različitim međuzonskim elektronskim prelazima u anatas TiO<sub>2</sub> nanoprahovima i ustanovila da se energija koja se može pripisati indirektnom prelazu između valentne i provodne zone povećava sa smanjenjem veličine kristalita. Ovaj rezultat je publikovan u sledećem radu:

M. Šćepanović, M. Grujić-Brojčin, M. Mirić, Z. Dohčević-Mitrović and Z.V. Popović  
"Optical Characterization of Laser-Synthesized Anatase TiO<sub>2</sub> Nanopowders by Spectroscopic Ellipsometry and Photoluminescence Measurements"  
*Acta Physica Polonica A* 116 (4) (2009) 603-606  
M23

Dr Grujić-Brojčin je takođe modifikovala MFO za primenu kod nanokristalnih agregata titanijum dioksida dopiranih gvožđem, gde je razmatran uticaj dopiranja gvožđem na pojavu tri faze titanijum dioksida u različitim uzorcima. Ovako prilagodjen MFO je primenjen na dve faze titanijum dioksida, anatas i rutil, i to 3D MFO na sferne nanočestice anatasa i 2D MFO na nanožice rutila, pokazavši tako da se povezivanjem rezultata Ramanove spektroskopije i XRPD može ostvariti kvalitetan uvid u morfologiju i heterogenost nanokristalnih agregata titanijum dioksida bogatih brukitom, sa malim količinama anatasa i rutila, čija pojava je korelisana sa koncentracijom dopanta Fe. Ovi rezultati objavljeni su u radu M21 kategorije:

A. Kremenović, M. Grujić Brojčin, A.-M. Welsch, P. Colombari  
Heterogeneity in iron-doped titania flower-like nanocrystalline aggregates: Detection of brookite and anatase/rutile size-strain modeling  
*Journal of Applied Crystallography* 46 (6) (2013) 1874-1876.  
DOI:10.1107/S0021889813025363  
M21

Zahvaljujući poznavanju velikog broja eksperimentalnih tehnika, numeričkih modela i optičkih karakteristika većeg broja oksidnih nanoprahova, dr Mirjana Grujić-Brojčin je dala značajan doprinos u objedinjavanju saznanja o uticaju metoda sinteze na optička svojstva oksidnih nanoprahova. Na osnovu toga objavljena su 3 pregledna rada u međunarodnim časopisima, od kojih 2 po pozivu, u kojima se detaljno opisuju različiti aspekti primene MFO na Ramanove spektre oksidnih nanoprahova.

i M. Grujić-Brojčin, M.J. Šćepanović, Z.D. Dohčević-Mitrović and Z.V. Popović  
"Use of Phonon Confinement Model in Simulation of Raman Spectra of Nanostructured Materials"  
*Acta Physica Polonica A* Vol. 116(1) (2009) 51-54  
M23

- ii Z.V. Popović, Z. Dohčević-Mitrović, M. Šćepanović, M. Grujić-Brojčin and S. Aškračić  
"Raman scattering on nanomaterials and nanostructures"  
*Annalen Der Physik* 523(1-2) (2011) 62-74  
M23
- iii Maja Šćepanović, Mirjana Grujić-Brojčin, Zorana Dohčević-Mitrović, and Zoran V. Popović  
Investigation of vibrational and electronic properties of oxide nanopowders by spectroscopic methods  
*Journal of Physics: Conference Series* 253 (2010) 012015

Na osnovu višegodišnjih istraživanja optičkih svojstava oksidnih nanoprahova, kao i doktorske disertacije dr Mirjane Grujić Brojčin, nastala je i monografija "Optička svojstva nanomaterijala", čiji je koautor dr Grujić-Brojčin. U ovoj monografiji su sažete tehnike optičke karakterizacije i numeričkog modelovanja, sa detaljnom razradom metodologije i prikazom najznačajnijih rezultata. Primena Ramanove, fotoluminescentne i infracrvene spektroskopije i spektroskopska elipsometrija u karakterizaciji čistih i dopiranih TiO<sub>2</sub> i CeO<sub>2</sub> nanoprahova, kao i mehanički aktiviranih ZnO nanoprahova, razmatrana je u korelaciji sa rezultatima drugih metoda, kao što su XRD, SEM, AFM, TEM, BET itd.

Z. D. Dohčević-Mitrović, M.J. Šćepanović, M. Grujić-Brojčin, Z. V. Popović  
"Optička svojstva nanomaterijala"  
Institut za fiziku, Akademska misao 2011.  
M41

## 1.2. Karakterizacija ZnO nanoprahova

U cilju ispitivanja vrste sopstvenih defekata i primesa uvedenih tokom procesa mehaničke aktivacije, dr Mirjana Grujić-Brojčin je analizirala aktivirane prahove cink-oksida primenom metoda Ramanove spektroskopije. Ramanovi spektri aktiviranih ZnO prahova ukazali su na strukturne i stehiometrijske promene u zavisnosti od vremena aktivacije i izbora aparature. Crveni pomeraj i širenje Ramanovih modova prvog reda  $E_2^{\text{high}}$  i  $E_1(\text{LO})$ , karakterističnih za ZnO, kod aktiviranih prahova pripisano je povećanoj neuređenosti prouzrokovanoj mlevenjem, praćenom smanjenjem korelacione dužine. Ovakvo ponašanje dr Mirjana Grujić-Brojčin uspešno je simulirala primenom MFO, modifikovanog tako da se uključi efekat anizotropije Brillouin-ove zone. Promene koncentracije defekata, procenjene primenom MFO i odnosa intenziteta karakterističnih modova  $E_1(\text{LO})/E_2^{\text{high}}$ , ukazale su na kiseonične vakancije kao dominantne defekte. Smanjenje odnosa intenziteta najintenzivnijeg Ramanovog moda drugog reda i  $E_1(\text{LO})$  moda prvog reda takođe se ponaša u skladu sa smanjenjem korelacione dužine u aktiviranim prahovima. Dodatni Raman modovi na ~510 i 550 cm<sup>-1</sup> u spektrima aktiviranih prahova pripisani su vibracijama površinskih optičkih fonona, koje se javljaju na granicama zrna između ultrafinih nanokristalita i neuređene oblasti u ZnO nanokristalitima. Ove modove je dr Grujić-Brojčin uspešno modelovala metodom koja uključuje dielektrične funkcije ZnO i njihovu zavisnost od poroznosti aktiviranih prahova usled prisustva vakancija, što je ukazalo na povećanje koncentracije defekata sa vremenom aktivacije u vibro-mlinu. Istim metodom ustanovljeno je da povećanje vremena aktivacije u planetarnom mlinu dovodi do izvesne relaksacije u prahovima, praćene smanjenjem koncentracije sopstvenih defekata, ali i pojavom uvedenih defekata usled kontaminacije u cirkonijumskim posudama za mlevenje.

Uticao neuređenosti na optička i elektronska svojstva aktiviranih ZnO takođe je ispitivan metodama fotoluminescentne spektroskopije i spektroskopske elipsometrije. Predložena je izmenjena interpretacija rezonantnog pojačanja Ramanovog rasejanja prvog i drugog reda u visokoneuređenim ZnO nanoprahovima. Detaljna analiza rezonantnog Ramanovog efekta u ZnO izazvanog laserskim zračenjem energije manje od energetske

procepa dala je značajne informacije o elektronskim stanjima unutar energetskog procepa ZnO nanoprahova. Uočeno je sistematska zavisnost jačine elektron-fonon sparivanja od korelacione dužine koja zavisi od neuređenosti kristalne rešetke ZnO.

Najvažniji rezultati koji se odnose na karakterizaciju mehanički aktiviranih ZnO prahova objavljeni su u 2 rada kategorije M21:

- i M. Šćepanović, M. Grujić-Brojčin, K. Vojisavljević, and T. Srećković  
"Defect induced variation in vibrational and optoelectronic properties of nanocrystalline ZnO powders"  
*Journal of Applied Physics* 109 (2011) 034313
- ii M. Šćepanović, M. Grujić-Brojčin, K. Vojisavljević, S. Bernik and T. Srećković  
"Raman study of structural disorder in ZnO nanopowders"  
*Journal of Raman Spectroscopy* 41 (2010) 914–921

### *1.3 Karakterizaciju ZnSe nanoslojeva primenom spektroskopske elipsometrije*

U okviru ovih istraživanja dr Mirjana Grujić-Brojčin je pokazala je da se može postići dobro slaganje eksperimentalnih i modelovanih elipsometrijskih spektara ako se ZnSe nanoslojevi tretiraju kao polikristalni materijal koji predstavlja smešu poroznog kristalnog ZnSe i amornog ZnSe primenom Bruggeman-ovog modela efektivne sredine. Ovakva struktura slojeva je u potpunoj saglasnosti sa rezultatima dobijenim primenom mikroskopa na bazi atomskih sila, kao i merenjima Ramanovog rasejanja i optičke transmisije. Rezultati dobijeni primenom spektroskopske elipsometrije takođe ukazuju na povećanje udela amorfne faze pri smanjenju debljine ZnSe sloja, što potvrđuje i kvantitativno opisuje nalaze dobijene mikroskopom na bazi atomskih sila. Rezultati ovog istraživanja, koji pokazuju da SE može dati veoma korisne informacije o kristaličnosti i nanostrukтури poluprovodničkih tankih slojeva, objavljeni su u radu:

M. Šćepanović, M. Grujić-Brojčin, D. Nesheva, Z. Levi, I. Bineva and Z.V. Popović  
"Characterization of ZnSe Nanolayers by Spectroscopic Ellipsometry"  
*Acta Physica Polonica A* 116 (4) (2009) 708-711  
M23

## **2. Modelovanje optičkih i poroznih svojstava nanostrukturnih oksida za fotokatalitičke primene**

Dr Mirjana Grujić-Brojčin je dala značajan doprinos uspešnoj primeni Ramanove spektroskopije za karakterizaciju čistih i dopiranih nanoprahova titanijum dioksida sintetisanih sol-gel metodom, namenjenih za fotokatalitičke primene. Iz merenja Ramanovog rasejanja određene su dominantne faze u sintetisanim nanoprahovima, kao i dimenzije i naprezanja u anatas nanokristalima primenom metode fononskog ograničenja. Ovi eksperimentalni rezultati, koji su u skladu sa XRD rezultatima, pokazali su da su svi sintetisani TiO<sub>2</sub> uzorci nanokristalni, sa dominantnom anatas fazom i malim sadržajem brukita. Ramanova spektroskopija takođe je korišćena za detektovanje i određivanje specifičnih površinskih grupa (CH, OH grupe) značajnih za proces fotokatalize, uprkos tome što se u tom spektralnom regionu javlja intenzivna fotoluminescencija. Zapaženo je da je mod na  $\sim 3700\text{ cm}^{-1}$ , pripisan vibracijama slobodnih hidroksilnih grupa aktivnih u procesu fotokatalize, prisutan kod čistih i uzoraka dopiranih lantanom koji pokazuju najveću fotokatalitičku aktivnost.

Uticaj dopiranja na energetski procep i energije elektronskih prelaza dr Mirjana Grujić-Brojčin ispitala je primenom spektroskopske elipsometrije. Analiza rezultata

pokazala je postojanje direktnog elektronskog prelaza u svim sintetisanim TiO<sub>2</sub> nanoprahovima, kao i da širina direktnog energetskog procepa u prahovima dopiranim lantanom raste sa povećanjem koncentracije La dopanta u TiO<sub>2</sub> zbog prisustva lantanovog oksida La<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Za potrebe ove analize dr Mirjana Grujić-Brojčin razvila je originalni softver.

Posebno značajan doprinos dr Mirjane Grujić-Brojčin predstavljaju analize rezultata merenja poroznosti nanoprahova titanijum dioksida. Osim BET i BJH metode, koje su uobičajene u analizi poroznosti, dr Grujić-Brojčin je porozne strukture sintetisanih prahova analizirala primenom CPS (*Corrugated pore structure*) modela, za koji je kreirala numerički model i razvila odgovarajući originalni softver. Na osnovu CPSM procenjivan je tzv. faktor "vijugavosti" (*tortuosity factor*), koji daje informacije o povezanosti pora, odnosno opisuje transportnu dinamiku porozne sredine, čime posredno određuje vreme fotokatalitičke reakcije i predstavlja veoma značajan parametar u analizi fotokatalitičke aktivnosti poroznih materijala. Treba napomenuti da se ovaj model i softver, koji se uspešno koriste za modelovanje poroznih svojstava nanoprahova titanijum dioksida, mogu koristiti i za druge porozne materijale.

Na osnovu ovih rezultata, poboljšana fotokatalitička svojstva čistih i dopiranih TiO<sub>2</sub> nanoprahova pripisana su manjoj dimenziji nanočestica, većoj specifičnoj površini i zapremini pora, kao i većoj kompleksnosti porozne strukture. Prisustvo izolovanih (slobodnih) hidroksilnih grupa kao izuzetno aktivnih pozicija u materijalu, registrovano je u TiO<sub>2</sub> nanoprahovima sa niskim sadržajem La, koji pokazuju najveću aktivnost u degradaciji metoprolola. U ovoj studiji takođe je pokazano da primenom metode spektroskopske elipsometrije može biti određena vrsta elektronskog prelaza u TiO<sub>2</sub>. Analiza ovih rezultata pokazuje postepeni rast energetskog procepa sa dopiranjem lantanom, što može biti pripisano modifikaciji površine nanočestica TiO<sub>2</sub>, što je i potvrđeno STM-STS merenjima. Do sada su iz ove oblasti objavljena 3 rada kategorije M21.

- i* Grujić-Brojčin, M., Armačić, S., Tomić, N., Abramović, B., Golubović, A., Stojadinović, B., Kremenović, A., Babić, B., Dohčević-Mitrović, Z., Šćepanović, M.  
Surface modification of sol-gel synthesized TiO<sub>2</sub> nanoparticles induced by La-doping  
*Materials Characterization* 88 (2014) 30-41.
- ii* A. Golubović, B. Abramović, M. Šćepanović, M. Grujić-Brojčin, S. Armačić, I. Veljković, B. Babić, Z. Dohčević-Mitrović, and Z. V. Popović  
"Improved efficiency of sol-gel synthesized mesoporous anatase nanopowders in photocatalytic degradation of metoprolol"  
*Materials Research Bulletin* 48 (4) (2013) 1363-1371.
- iii* M. Šćepanović, B. Abramović, A. Golubović, S. Kler, M. Grujić-Brojčin, Z. Dohčević-Mitrović, B. Babić, B. Matović, Z. V. Popović  
"Photocatalytic degradation of metoprolol in water suspension of TiO<sub>2</sub> nanopowders prepared using sol-gel route"  
*Journal of Sol-Gel Science and Technology* 61 (2012) 390-402

### 3. Primena metoda optičke spektroskopije u zaštiti kulturnih dobara

Dr Mirjana Grujić-Brojčin započela je 2013. godine aktivnosti na primeni metoda optičke spektroskopije u oblasti proučavanja i zaštite kulturnih dobara u okviru bilateralnog projekta "Scientific and technological cooperation between Sapienza University of Rome and University of Belgrade in the area of Cultural Heritage" koji je Institut za fiziku potpisao sa Univerzitetom Sapienza u Rimu. U okviru ove aktivnosti, dr Grujić-Brojčin se bavi ispitivanjem bojenih površina sa antičkih fresaka pronađenih na lokalitetu Sirmium i

keramičkih artefakata sa nalazišta Kale-Krševica, u saradnji sa kolegama iz Instituta za arheologiju SANU i Instituta za nuklearne nauke Vinča.

### Tabele naučne kompetentnosti kandidata

i) *Ukupno*

M21=	6x8	=48
M22=	1x5	= 5
M23=	9x3	=18
M51=	1x1.5	= 2
M41=	1x7	= 7
<b>Ukupno</b>		<b>80</b>

ii) *Od izbora u zvanje viši naučni saradnik*

Potreban broj bodova kandidata po kategorijama i ukupno			Zbir bodova kandidata	
		Za izbor		Za reizbor
<b>Viši naučni saradnik</b>	<i>Ukupno potrebno</i>	<b>48</b>	<b>24</b>	<b>80</b>
	M10+M20+M31+M32+ +M33+M41+M42+M51 $\geq$	40	20	80
	M11+M12+M21+M22+M23+ +M24+M31+M32+M41+M42 $\geq$	28	14	73

Dr Mirjana Grujić-Brojčin je publikovala dva rada kategorije M52 na srpskom jeziku.

Dr Mirjana Grujić-Brojčin bila je recenzent u više međunarodnih časopisa, među kojima su: Materials Chemistry and Physics, Journal of Optics, Processing and Application of Ceramics, Materials Science and Engineering B, physica status solidi.

2011. godine učestvovala je kao koautor u izradi naučne monografije nacionalnog značaja "Optička svojstva nanomaterijala" (Z. Dohčević-Mitrović, M. Šćepanović, M. Grujić-Brojčin, Z. V. Popović). Ova monografija predstavlja prvu publikaciju iz ove oblasti na srpskom jeziku, čime značajno doprinosi obrazovanju mladih naučnika u našoj zemlji. Monografija daje pregled eksperimentalnih metoda optičke spektroskopije (Ramanova, fotoluminescentna, infracrvena spektroskopija, spektroskopska elipsometrija) i njihove primene na različite nanostrukturne materijale (oksidne nanoprahove čistih i dopiranih TiO<sub>2</sub>, CeO<sub>2</sub>, zatim mehanički aktivirane ZnO nanoprahove itd.), kao i brojne metode koji se koriste za modelovanje vibracionih spektara ovih materijala. Baveći se tokom više godina razvojem i usavršavanjem numeričkih metoda vezanih za vibracionu spektroskopiju nanostrukturnih materijala, dr Mirjana Grujić-Brojčin dala je originalan doprinos ovom delu. Istraživanja dr Grujić-Brojčin koja obuhvataju modele fononskog ograničenja i aproksimacije efektivne sredine, koji predstavljaju nezamenljive tehnike za pravilnu interpretacije Ramanovih i infracrvenih spektara nanostrukturnih materijala, našla su istaknuto mesto u ovoj monografiji.

Dr Grujić-Brojčin je angažovana na projektima Ministarstva za prosvetu, nauku i tehnološki razvoj: III45018 "Nanostrukturni multifunkcionalni materijali i nanokompoziti",

pod rukovodstvom prof. dr Zoran V. Popović i ON17032 "Fizika nanostrukturnih oksidnih materijala i jako korelisanih sistema", pod rukovodstvom dr. Zorana Dohčević-Mitrović.

Dr Mirjana Grujić-Brojčin aktivno učestvovala u projektu bilateralne saradnje **SCOPES** sa Institutom za fiziku polimera Federalnim tehničkim institutom Carih (ETH Zurich) Švajcarska (2009-2012. godine). U okviru ovog projekta bavila se Ramanovom spektroskopijom nanoprahova za fotokatalitičke primene i numeričkim simulacijama Ramanovih spektara i poroznih svojstava oksidnih nanoprahova. Pored toga, aktivno učestvuje u **2 bilateralna projekta**:

- i* Od 2013. godine, "**Scientific and technological cooperation between Sapienza University of Rome and University of Belgrade in the area of Cultural Heritage**" koji je Institut za fiziku potpisao sa Univerzitetom Sapienza u Rimu. Dr Mirjana Grujić-Brojčin se u okviru ovog projekta bavi primenom Ramanove spektroskopije u oblasti proučavanja i zaštite kulturnih dobara, konkretno izučavanjem bojениh površina i keramika sa antičkih nalazišta na teritoriji Republike Srbije.
- ii* Od 2004. godine, "**Raman Scattering and Photoluminescence from Semiconductor Nanoparticles**", koji je sklopljen 2004. godine između Instituta za fiziku čvrstog stanja Bugarske akademije nauka i Centra za fiziku čvrstog stanja i nove materijale Instituta za fiziku (projekat se realizuje kroz Ugovor o naučnoj saradnji između Srpske akademije nauka i umetnosti (SANU) i Bugarske akademije nauka (BAS)). U okviru ovog projekta dr Mirjana Grujić-Brojčin bavi se numeričkim modelovanjem Ramanovih spektara.

Dr Grujić-Brojčin dala je takođe značajan doprinos u realizaciji **dva inovaciona projekta**:

- i* 2008-2009. godine inovacioni projekat „Proizvodnja nanoprahova čistog i dopiranog anatasa vrhunskog kvaliteta pomoću sol-gel tehnologije“ (rukovodilac dr Aleksandar Golubović)
- ii* 2012-2013. godine inovacioni projekat "Proizvodnja visokokvalitetnih TiO<sub>2</sub> nanoprahova efikasnih u fotokatalitičkoj razgradnji organskih zagađivača" (rukovodilac dipl. inž. Dejan Ćukalović)

Dr Mirjana Grujić-Brojčin je **član organizacionog odbora Društva za keramičke materijale Srbije**, koje je organizovalo dve **međunarodne konferencije**

- i* Drugu konferenciju Društva za keramičke materijale Srbije, 5-7. juna 2013. godine u Beogradu
- ii* Prvu konferenciju Društva za keramičke materijale Srbije, 17-18. marta 2011. godine u Beogradu

Takođe je bila **član organizacionog odbora međunarodne naučne konferencije International School and Conference on Photonics, PHOTONICA 09**, održanoj od 24. do 28. avgusta 2009. god. u Beogradu.

Od prethodnog izbora u zvanje dr Mirjana Grujić-Brojčin objavila je 13 radova u međunarodnim časopisima, od čega **6 radova M21** (u vrhunski međunarodni), **1 rad M22** (vođeci međunarodni) i **6 radova M23** (međunarodni sa ISI liste).

Publikovala je do sada ukupno preko 60 naučnih referenci, od čega 35 radova u međunarodnim časopisima sa ISI liste.

Na osnovu pretrage indeksnih baza Web of Science/Scopus, za period od 1997. do kraja marta 2014. godine naučni radovi koje je dr Mirjana Grujić-Brojčin objavila citirani su



više od **290 puta u međunarodnim časopisima, od toga 240 puta ne računajući autocitate.** H indeks 8.

## MIŠLJENJE I PREDLOG

Dr Mirjana Grujić-Brojčin značajno je doprinela razvoju metodologije ispitivanja nanostrukturnih materijala primenom Ramanove, fotoluminescentne i infracrvene spektroskopije i spektroskopske elipsometrije, pre svega kroz razvoj i adaptaciju odgovarajućih numeričkih modela za analizu eksperimentalnih rezultata. Proširila je model fononskog ograničenja za analizu Ramanovih spektara široke klase nanostrukturnih materijala, uključujući i modelujući niz karakterističnih efekata. Pored modela fononskog ograničenja, dr Grujić-Brojčin uspešno je modelovala pojavu dodatnih Ramanovih modova koji su kod polarnih poluprovodničkih nanostrukture pripisani vibracijama površinskih optičkih fonona. Takođe, bavila se proširenjem generalisanog Bruggeman-ovog modela efektivne sredine na druge nanostrukture. Svi ovi modeli i programi korišćeni su za analizu spektara raznovrsnih nanostrukturnih materijala, od kojih treba istaći (i) čiste TiO<sub>2</sub> nanoprahove i TiO<sub>2</sub> nanoprahove dopirane lantanom i vanadijumom, dobijene sol-gel i hidrotermalnom metodom sinteze, (ii) nanokristalnih agregata titanijum dioksida dopiranih gvožđem (iii) ZnO nanoprahove, (iv) ZnSe nanoslojeve itd.

Sistematizacija i analiza dosadašnjih eksperimentalnih rezultata iz ovih oblasti, koja je objavljena u monografiji "Optička svojstva nanomaterijala", čiji je dr Mirjana Grujić-Brojčin koautor, doprinela je formiranju potpunije slike o strukturnim, morfološkim, optičkim i elektronskim svojstvima široke klase nanostrukturnih materijala.

Takođe, svojim aktivnim radom u proteklih 5 godina, dr Grujić-Brojčin doprinema je razumevanju uticaja uslova sinteze na njihove željene karakteristike titanijum dioksidnih nanoprahova i njihovu potencijalnu primenu u oblasti fotokatalitičke degradacije organskih zagađivača koji se javljaju u vodenoj sredini. Kao posebno značajan doprinos dr Mirjane Grujić-Brojčin u okviru ovih aktivnosti može se istaći analiza rezultata merenja poroznosti nanoprahova titanijum dioksida namenjenih za fotokatalitičku degradaciju organskih zagađivača metoprolola i alprazolama. dr Grujić-Brojčin je za analizu porozne strukture sintetisanih nanoprahova titanijum dioksida primenila Corrugated Pore Structure Model, za koji je adaptirala numerički model i razvila odgovarajući originalni softver. Ovaj model i softver mogu se koristiti i za druge porozne materijale.

Dr Grujić-Brojčin je učestvovala u pripremi i realizaciji nekoliko nacionalnih, inovacionih i međunarodnih projekata. Trenutno je angažovana na dva nacionalna projekta i dve međunarodne bilateralne saradnje.

Od prethodnog izbora u zvanje 2009. godine dr Mirjana Grujić-Brojčin objavila je 13 radova u međunarodnim časopisima, od čega **6 radova M21** (u vrhunski međunarodni), **1 rad M22** (vodeći međunarodni) i **6 radova M23** (međunarodni časopisi sa ISI liste).

Do sada je publikovala preko 60 naučnih referenci, od čega 35 radova u međunarodnim časopisima sa ISI liste. Na osnovu pretrage indeksnih baza Web of Science/Scopus, za period od 1997. do kraja marta 2014. godine ovi naučni radovi citirani su više od **290 puta u međunarodnim časopisima, od toga 240 puta ne računajući autocitate.** H indeks = 8.

Imajući sve navedeno u vidu, Komisija smatra da je kandidatkinja u potpunosti ispunila uslove za sticanje naučnog zvanja za koje konkuriše. Stoga Komisija sa zadovoljstvom

### **P R E D L A Ž E**

Naučnom veću Instituta za fiziku u Beogradu da donese odluku o prihvatanju predloga za **reizbor dr Mirjane Grujić-Brojčin u zvanje viši naučni saradnik.**

Članovi Komisije:

dr Maja Šćepanović  
naučni savetnik, Institut za fiziku, **prvi referent**

dr Aleksandar Golubović  
naučni savetnik, Institut za fiziku

prof. dr Dejan Raković  
redovni profesor  
Elektrotehnički fakultet Univerziteta u Beogradu

U Beogradu, 26. 05. 2014. godine