

# НАУЧНОМ ВЕЋУ ИНСТИТУТА ЗА ФИЗИКУ БЕОГРАД

На седници Научног већа Института за физику одржаној 18. јула 2017. изабрани смо за чланове комисије за реизбор Јелена Пешић у звање истраживач сарадник. На основу увида у достављен материјал и личног познавања кандидаткиње подносимо следећи

## ИЗВЕШТАЈ

### 1. Биографски подаци

Јелена Пешић је рођена у Београду, општина Савски Венац, Република Србија, 17. децембра 1986. године. Основну школу и гимназију је завршила у Земуну. Основне студије је завршила 2013. године на Физичком факултету, Универзит у Београду, на смеру за Теоријску и експерименталну физику са просеком од 8.9 и дипломским испитом 10. Тема дипломског рада је била: “Примена GPU програмирања у DFT прорачунима”, а ментор је био др Радош Гајић. Докторске студије је уписала на Физичком факултету, Универзитет у Београду, школске 2012/13. године, ужа научна област: физика кондензоване материје и статистичка физика. У Институту за физику је запослена од 06. новембра 2013. године на пројекту ОИ171005 “Физика уређених наноструктура и нових материјала у нанофотоници”. Ради у Лабораторији за графен, друге 2Д материјале и уређене наноструктуре Центра за физику чврстог стања и нове материјале. 23. децембра 2014 је изабрана у звање истраживач сарадник. У октобру 2016. године Јелени Пешић је Веће Универзитета у Београду усвојило тему докторске дисертације под називом: **„Investigation of Superconductivity in Graphene and Related Materials Based on Ab-initio Methods“** (Истраживање суперпроводности у графену и сличним материјалима коришћењем ab-initio метода). Ментор је др Радош Гајић.

**23. јуна 2017. године Јелена Пешић је предала дисертацију Физичком факултету Универзитета у Београду. Одбрана дисертације се очекује у току јесени 2017. године.**

### 2. Научна активност

Јелена Пешић се бави теоријским истраживањем графена и сличних дводимензионих материјала коришћењем ab-initio метода заснованих на теорији функционала густине (ДФТ). Фокус истраживања је на електрон-фононској интеракцији и суперпроводности у овим материјалима.

Истраживање обухвата студију монослоја графена допираног алкалним металима (литијум, баријум и калцијум) по узору на интеркалирани графит. Електронске и вибрационе особине су проучаване у овим материјалима, а посебно електрон-фононска интеракција у графену допираном литијумом. Изучавана је могућност појачања електрон-фононске интеракције и подизање критичне температуре применом механичких модификација, тј. напрезања/истезања. Показано је да у графену допираном литијумом применом двоосовинског истезања, због омекшавања фононских мода, долази до појачања електрон-фононске интеракције и повећања критичне температуре до близу 30К. Проучаване су и оптичке особине монослоја графена допираног литијумом и показано је да допирање литијумом не утиче значајно на оптичке особине графена и да се он може користити у применама где је графен коришћен али уз предности присуства адатома литијума.

Даље истраживање се бави новим дводимензионим суперпроводним материјалом, структурно и електронски сличном графену, монослојем магнезијум-дихлорида. Проучаване су електронске и фононске особине у овом материјалу, а такође изведена је студија стабилности и симетријска анализа овог материјала. Коментор за симетријску анализу у тези и свим радовима је др Владимир Дамљановић. Електрон-фононска интеракција и суперпроводност су проучавани и дискутована је паралела са допираним графеном. Показано је да монослој магнезијум-дихлорида има критичну температуру око 20К. По узору на претходну целину, проучавана је могућност појачања електрон-фононске интеракције применом напрезања/истезања где је показано да се критична температура може повећати до 30К. Резултати овог истраживања су у процесу објављивања у време подношења овог извештаја. Идеја истраживања није само појединачно проучавање дводимензионих суперпроводних материјала већ и тражење заједничких особина и правилности у циљу бољег разумевања суперпроводности у нискодимензионим материјалима, као и могућности предвиђања нових суперпроводних материјала. **До сада је као водећи аутор објавила четири рада из области истраживања за докторску дисертацију.**

Истраживање Јелена Пешић обухвата још две додатне целине. Једна је проучавање примене хардверских убрзања у ДФТ прорачунима. Фокус је на истраживању коришћења графичких процесора (ГПУ) у прорачунима нискодимензионих материјала. Друга обухвата експериментално истраживање графена и других дводимензионих материјала. Јелена Пешић се бави механичком ексфолијацијом графена и његовом применом као заштитног слоја за наноструктуре, али и применом течно-ексфолираног графена у макроскопским применама, као проводно мастило за штампу, за флексибилну електронику, итд. **У оквиру експерименталног истраживања Јелена Пешић је коаутор на четири публикације у међународним часописима.**

**Јелена Пешић учествује на три међународна пројекта.** Први је пројекат билатералне сарадње са НР Кином и Универзитетом у Шангају, “Раст кристала и специфична физика нормалног стања ReBCO”, који води заједно са др Радошом Гајићем.

Други је билатерални пројекат са Аустријом, Универзитет у Леобену и трећи је пројекат Texas A & M Универзитета у Катару који се бави истраживањем утицаја субстрата на интеркалирани графен "Intercalated graphene: effects of substrates on functionalities".

Додатно, у току писања овог извештаја Јелена Пешић има један рад на рецензији и један у припреми за слање у међународни часопис, оба везана за тему дисертације. **Укупно је до сада публиковала 2 рада категорије M21a, 3 категорије M21 и 3 категорије M22. Такође, је учествовала до сада на 14 домаћих и међународних конференција и школа.**

**Јелена Пешић је била коментор мастер тезе дипломираног инжењера електротехнике Андријане Шолајић под насловом „DFT study of electron and phonon properties of Sr and Yb doped graphene“.** Ова теза је предата Електротехничком факултету у Београду и биће одбрањена крајем лета.

### **3. Списак публикација кандидата**

#### **РАДОВИ У МЕЂУНАРОДНИМ ЧАСОПИСИМА ИЗУЗЕТНИХ ВРЕДНОСТИ (M21A):**

1. Matković A., Milošević I., Milićević M., Tomašević-Ilić T., **Pešić J.**, Musić M., Spasenović M., Jovanović Đ, Vasić B., Deeks C., Panajotović R., Belić M. and Gajić R., „Enhanced sheet conductivity of Langmuir–Blodgett assembled graphene thin films by chemical doping“ 2D Mater. 3 015002 (2016)
2. Prinz, J., Matković, A., **Pešić, J.**, Gajić, R. and Bald, I, "Hybrid Structures for Surface-Enhanced Raman Scattering: DNA Origami/Gold Nanoparticle Dimer/Graphene" Small, doi:10.1002/sml.201601908 (2016)

#### **РАДОВИ У ВРХУНСКИМ МЕЂУНАРОДНИМ ЧАСОПИСИМА (M21):**

3. **Pešić J.**, Damljanović V., Gajić R., Hingerl K. and Belić M., „Density functional theory study of phonons in graphene doped with Li, Ca and Ba“ EPL, 112 6 67006 (2015)
4. **Pešić J.**, Gajić R., Hingerl K. and Belić M., "Strain-enhanced superconductivity in Li-doped graphene", EPL 108 67005 (2014)
5. Matković A., Vasić B., **Pešić J.**, Prinz J., Bald I., Milosavljević A. and Gajić R., „Enhanced structural stability of DNA origami nanostructures by graphene encapsulation“, New J. Phys. 18 025016 (2016)

## РАДОВИ У ИСТАКНУТИМ МЕЂУНАРОДНИМ ЧАСОПИСИМА (M22):

6. **Pešić J.** and Gajić R., „Ab-initio study of the optical properties of the Li-intercalated graphene and MoS<sub>2</sub>“, Opt Quant Electron, 48:368 (2016)
7. **Pešić J.**, and R. Gajić. "Advantages of GPU technology in DFT calculations of intercalated graphene" Phys. Scr.T162 014027 (2014)
8. Tomašević-Ilić T., **Pešić J.**, Milošević I., Vujin J., Matković A., Spasenović M., Gajić R. „Transparent and conductive films from liquid phase exfoliated graphene“, Opt. Quant. Electron. 48:319 (2016)

## ПРЕДАВАЊЕ ПО ПОЗИВУ СА МЕЂУНАРОДНОГ СКУПА ШТАМПАНО У ИЗВОДУ M32:

- A. Matković, I. Milošević, M. Milićević, A. Beltaos, T. Tomašević-Ilić, **J. Pešić**, M. M. Jakovljević, M. Musić, U. Ralević, M. Spasenović, Dj. Jovanović, B. Vasić, G. Isić and R. Gajić “Spectroscopic and Scanning Probe Microscopic Investigations and Characterization of Graphene”, *XIX Symposium on Condensed Matter Physics, SFKM 2015*, Beograd, Srbija, 07.09.2015 - 11.09.2015, str 32

## САОПШТЕЊЕ СА МЕЂУНАРОДНОГ СКУПА ШТАМПАНО У ИЗВОДУ M34:

- **J. Pešić**, I. Popov, V. Damljanović, R. Gajić, “Enhancement of electron-phonon coupling in alkali-doped graphene and thin MgB<sub>2</sub> layers” *18th International Workshop on Computational Physics and Materials Science: Total Energy and Force Methods* January 12-14, 2017 Miramare, Trieste, Italy
  - M. Spasenović, T.Tomašević-Ilić, **J. Pešić**, A. Matković, R. Gajić, “Transparent and Conductive Films With Liquid Phase Exfoliated Graphene” *Researcher and Society* 2016, Marie Curie Alumni Association (MCAA), Velika Britanija, 28.07.2016, - 29.07.2016,
  - B. Vasić, A. Matković, **J. Pešić**, J. Prinz, I. Bald, A. Milosavljević, R. Gajić, “Graphene as a protective coating for macromolecules: AFM manipulation study”, *The Second European Workshop on Understanding and Controlling Nano and Mesoscale Friction* 2016, COST Action MP1303, Letonija, 04.07.2016, - 07.07.2016
1. M. Spasenović, T.Tomašević-Ilić, **J. Pešić**, A. Matković, R. Gajić, “Transparent and Conductive Films With Liquid Phase Exfoliated Graphene”, *Euroscience Open Forum (ESOF) (M34)*, 2016, EuroScience Foundation (ESF), Velika Britanija, 23.07.2016, - 27.07.2016,

2. J. Prinz, A. Matković, **J. Pešić**, B. Vasić, I. Bald, "DNA origami-gold nanoparticle-graphene double hybrid structures for surface-enhanced Raman scattering", DNA-Nanotechnology, Jena, Nemačka, 19.05.2016 – 21.05.2016.
3. **J. Pešić**, R. Gajić "Ab-initio study of optical properties of alkali metal-intercalated graphene and MoS<sub>2</sub>", *Photonica 2015*, 978-86-7306-131-3, Beograd, Srbija, 24.08.2015 - 28.08.2015., str 193
4. T. Tomašević-Ilić, **J. Pešić**, I. Milošević, J. Vujin, A. Matković, M. Spasenović, R. Gajić "Transparent and conductive films from liquid phase exfoliated graphene" *Photonica 2015*, 978-86-7306-131-3, Beograd, Srbija, 24.08.2015 - 28.08.2015., str. 191
5. A. Matković, I. Milošević, M. Milićević, T. Tomašević-Ilić, **J. Pešić**, M. Musić, M. Spasenović, Dj. Jovanović, B. Vasić, M. R. Belić and R. Gajić, "Chemical Doping of Langmuir-Blodgett Assembled Graphene Films for Flexible Transparent Conductive Electrodes" *XIX Symposium on Condensed Matter Physics, XIX Symposium on Condensed Matter Physics, SFKM 2015*, Beograd, Srbija, 07.09.2015 - 11.09.2015, str. 93
6. **J. Pešić**, R. Gajić, "Density Functional Theory Study of Li and Ti-Intercalated graphene", *XIX Symposium on Condensed Matter Physics, SFKM 2015*, Beograd, Srbija, 07.09.2015 - 11.09.2015, str. 99
7. **J. Pešić**, V. Damljanović, R. Gajić, M. Milićević, K. Hingerl, "Density Functional Theory Study of Phonons in mono and bilayer intercalated graphene" *10 years from the discovery of graphene* 2014, Univ. of Patras & FORTH/ICE-HT, Patras, Grčka, 14.07.2014 - 17.07.2014,
8. A. Matković, M. Milićević, I. Milošević, **J. Pešić**, B. Vasić, M. Spasenović, R. Gajić, "Relating nanoscopic structure to macroscopic properties of liquid-phase exfoliated graphene", *13th Young Researchers' Conference – Materials Science and Engineering 2014*, Beograd, Srbija, 10.12.2014 - 12.12.2014, str 71.
9. **J. Pešić**, V. Damljanović, R. Gajić, "First Principle Calculation of Phonons and Electron-Phonon Interaction in Graphene", *13th Young Researchers' Conference – Materials Science and Engineering 2014*, Beograd, Srbija, 10.12.2014 - 12.12.2014, str 19.
10. **J. Pešić**, R. Gajić, "Advantages of GPU technology on the DFT" *IV International School and Conference on Photonics-PHOTONICA'13*, 2013, 978-86-82441-36-6, Beograd, Srbija, 26.08.2013 - 30.08.2013, str 10

#### 4. Цитати – 21 цитат

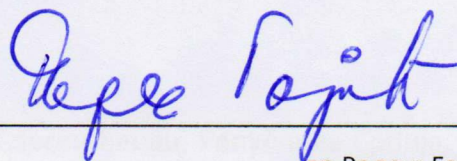
- **Pešić J.**, Gajić R., Hingerl K. and Belić M., "Strain-enhanced superconductivity in Li-doped graphene", *EPL* 108 67005 (2014) - 7 цитата
  - Durajski, A. P. "Effect of layer thickness on the superconducting properties in ultrathin Pb films." *Superconductor Science and Technology* 28.9 (2015): 095011.
  - Zheng, Jing-Jing, and E. R. Margine. "First-principles calculations of the superconducting properties in Li-decorated monolayer graphene within the anisotropic Migdal-Eliashberg formalism." *Physical Review B* 94.6 (2016): 064509.
  - Rathi, Keerti, and Kaushik Pal. "Impact of Doping on GO: Fast Response–Recovery Humidity Sensor." *ACS Omega* 2.3 (2017): 842-851.
  - Szczyński, Dominik. "Superconducting properties of lithium-decorated bilayer graphene." *EPL (Europhysics Letters)* 111.1 (2015): 18003.
  - Sabzyan, Hassan; Sadeghpour, Narges "Importance of Unit Cells in Accurate Evaluation of the Characteristics of Graphene" *Zeitschrift fur Naturforschung - Section A Journal of Physical Sciences*, 71, 4 (2016), 315-332.
  - Pešić, Jelena, et al. "Density functional theory study of phonons in graphene doped with Li, Ca and Ba." *EPL (Europhysics Letters)* 112.6 (2016): 67006.
  - Pešić, Jelena, and Radoš Gajić. "Ab-initio study of the optical properties of the Li-intercalated graphene and MoS<sub>2</sub>." *Optical and Quantum Electronics* 48.7 (2016): 1-7.
- **Pešić J.**, V Damjanović, R Gajić, K Hingerl, M Belić, "Density functional theory study of phonons in graphene doped with Li, Ca and Ba", *EPL*, 112 (6), 67006 - 3 цитата
  - Nika, Denis L., and Alexander A. Balandin. "Phonons and thermal transport in graphene and graphene-based materials." *Reports on Progress in Physics* 80.3 (2017): 036502.
  - Guo, Xiaopeng, et al. "Large-area uniform electron doping of graphene by Ag nanofilm." *AIP Advances* 7.4 (2017): 045209.
  - Pešić, Jelena, and Radoš Gajić. "Ab-initio study of the optical properties of the Li-intercalated graphene and MoS<sub>2</sub>." *Optical and Quantum Electronics* 48.7 (2016): 1-7.
- Prinz, J., Matković, A., **Pešić, J.**, Gajić, R. and Bald, I, "Hybrid Structures for Surface-Enhanced Raman Scattering: DNA Origami/Gold Nanoparticle Dimer/Graphene" *Small*, doi:10.1002/sml.201601908 (2016) - 3 цитата
  - Olejko, Lydia, and Ilko Bald. "FRET efficiency and antenna effect in multi-color DNA origami-based light harvesting systems." *RSC Advances* 7.39 (2017): 23924-23934.
  - Hong, Fan, et al. "DNA Origami: Scaffolds for Creating Higher Order Structures." *Chemical Reviews* (2017).

- Heck, Christian; Prinz, Julia; Dathe, Andre; et al "Gold Nanolenses Self-Assembled by DNA Origami", *ACS Photonics*, 4, 5, 1123-1130, (2017)
- A Matković, B Vasić, **J Pešić**, J Prinz, I Bald, AR Milosavljević, R Gajić, "Enhanced structural stability of DNA origami nanostructures by graphene encapsulation" *New Journal of Physics* 18 (2), 025016 - 5 цитата
  - Vasić, Borislav, et al. "Wear properties of graphene edges probed by atomic force microscopy based lateral manipulation." *Carbon* 107 (2016): 723-732.
  - Prinz, Julia, et al. "Hybrid Structures for Surface-Enhanced Raman Scattering: DNA Origami/Gold Nanoparticle Dimer/Graphene." *Small* 12.39 (2016): 5458-5467.
  - Rajendran, Arivazhagan, et al. "Nucleic Acids-Templated Enzyme Cascades." *ChemBioChem* (2017).
  - Lin, Wan-Ing. *Enhanced Raman scattering of molecular monolayers*. Diss. Humboldt-Universität zu Berlin, Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät, 2017.
  - Vasić, Borislav, et al. "Nanoscale wear of graphene and wear protection by graphene." *Carbon* 120 (2017): 137-144.
- A Matković, I Milošević, M Milićević, T Tomašević-Ilić, J Pešić, M Musić et al." Enhanced sheet conductivity of Langmuir–Blodgett assembled graphene thin films by chemical doping", *2D Materials* 3 (1), 015002 (2016) - 3 цитата
  - Pešić, Jelena, and Radoš Gajić. "Ab-initio study of the optical properties of the Li-intercalated graphene and MoS<sub>2</sub>." *Optical and Quantum Electronics* 48.7 (2016): 1-7.
  - Tomašević-Ilić, Tijana, et al. "Transparent and conductive films from liquid phase exfoliated graphene." *Optical and Quantum Electronics* 48.6 (2016): 319.
  - Hui, Fei, et al. "Graphene and related materials for resistive random access memories." *Advanced Electronic Materials* (2017).

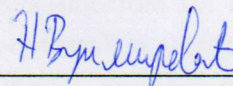
## ЗАКЉУЧАК

На основу изложеног закључује се да је кандидаткиња испунила све услове из Закона о научно-истраживачкој делатности и Правилника о поступку, начину вредновања и квантитативном исказивању научноистраживачких резултата истраживача за реизбор у звање истраживач сарадник. Стога комисија предлаже Научном већу Института за физику у Београду да Јелену Пешић реизабере у звање истраживач сарадник.

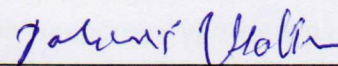
Београд,  
31. јул 2017.



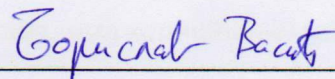
др Радош Гајић,  
научни саветник, Институт за физику у Београду



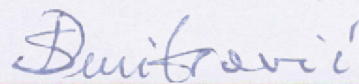
др Ненад Вукмировић,  
научни саветник, Институт за физику у Београду



др Владимир Дамљановић,  
научни сарадник Институт за физику у Београду



др Борислав Васић,  
научни сарадник, Институт за физику у Београду



др Саша Дмитровић,  
доцент, Физички факултет, Универзитет у Београду



UNIVERSITY OF BELGRADE  
SCHOOL OF ELECTRICAL ENGINEERING



DFT study of electron and phonon properties of  
Sr and Yb doped graphene

master thesis

thesis advisor:  
doc. dr Vladimir Arsoski

candidate:  
Andrijana Šolajić, 2016/3129

Belgrade, 2017.

## Acknowledgements

*First and special, I would like to thank Prof. Dr Radoš Gajić, for welcoming me with open arms and giving me the opportunity to be a part of his group and work on this thesis. His passion and enthusiasm for physics and scientific research were more than motivating for me from the first day being there and strengthened my love for physics even more.*

*I would like to thank Jelena Pešić for great supervising and cooperation. Her guidance and useful advices were of enormous significance for me and helped me to learn a plenty of new things and explore a whole new area with ease. My deepest gratitude goes to her for all the given support and for having faith in me the whole time.*

*This thesis is completely done in the Center for Solid State Physics and New Materials (CSSPNM), Institute of Physics. I am grateful to Prof. Dr Zoran Popović for providing me the opportunity to be in the CSSPNM.*

*I am thankful to all colleagues in the GLAB group for pleasant and friendly atmosphere.*

*This work is supported by the Serbian MPNTR through Project OI 171005 and by Qatar National Research Foundation through Projects NPRP 7-665-1-12.*