

2. БИОГРАФСКИ ПОДАЦИ КАНДИДАТА

Др 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 уписала 2005. године на Физичком факултету, Универзитет у Београду, на смеру за Теоријску и експерименталну физику. Докторске студије је уписала на Физичком факултету, Универзитет у Београду, школске 2012/13. године, ужа научна област: Физика Кондензоване Материје. У Центру за физику чврстог стања и нове материјале Института за физику у Београду од 08. новембра 2013. године је запослена као истраживач-приправник на пројекту ОИ171005 “Физика уређених наноструктура и нових материјала у нанофотоници”. Дисертацију 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) под менторством др Радош Гајића, је одбранила 4. децембра 2017. године на Физичком факултету Универзитета у Београду. Од 2018. године је научни сарадник у Лабораторији за 2Д материјале, у Центру за физику чврстог тела и нове материјале, Институт за физику Универзитета у Београду. Њен рад је фокусиран на прорачуне теорије функционала густине на 2Д материјалима, графену, слојевитим материјалима и нискодимензионалним кристалним системима и електронској структури, магнетним својствима, динамиком решетке и електрон-фононској интеракцији, као и суперпроводности у 2Д материјалима.

Јелена Пешић је учествовала на пројектима међународне сарадње са Аустријом, Немачком, Кином и Катаром. Током 2014. и 2015. године учествовала је на иновационом пројекту под називом „Функционална мастила на бази графена и штампање радио-фреквентних идентификатора“ који се фокусирао на коришћење течне дисперзије графена као мастила за штампање флексибилне електронике. У периоду 2020-2021. учествује на пројекту позива Доказ концепта, Фонда за иновациону делатност, Република Србија - ИД пројекта 5574 “Дрво ојачано наноматеријалима за конструкционе елементе”. Такође има искуство у микромеханичкој експлозијацији 2Д материјала. Учесник је на 2 COST акције. Јелена је била руководилац пројекта билатералне сарадње Србије и Аустрије у периоду 2018-2020. У периоду од августа 2020 до јануара 2023. године учествовала је на пројекту Фонда за науку Републике Србије у позиву ПРОМИС: „StrainedFeSC - Strain effects in iron chalcogenide superconductors“ под руководством др Ненада Лазаревића. У периоду септембар 2021 - децембар 2021, Јелена Пешић је добила стипендију за истраживање Аустријске академије наука у оквиру програма Joint Excellence in Science and Humanities (JESH). Пројекат „Ефекти изазвани деформацијом на магнетне интеракције и оптичке рекомбинације у 2Д слојевитим системима“ је урађен у сарадњи са Институтом за физику полупроводника и чврстог стања, Универзитета Јоханес Кеплер у Линцу, Аустрија. У свом истраживању је остварила сарадњу са Јоханес Кеплер Универзитетом у Линцу, Аустрија, као сарадник у оквиру Zentrum für Oberflächen- und Nanoanalytik који води проф. др. Курт Хингерл и сарадник у оквиру групе QMAG- Quantum Materials Group у Институту за физику полупроводника и чврстог стања, коју води проф. Др. Алберта Бонани.

Јелена Пешић је учествовала у организацији 3 међународна научна скупа у Београду (2 конференције и радионица). У току подношења овог извештаја Јелена Пешић је председник Организационог одбора за конференцију Симпозијум Физике Кондензоване Материје (СФКМ) која ће се одржати у Београду у јуну 2023. У Центру за физику чврстог стања и нове материјале води

теоријска истраживања на 2Д материјалима, активно ради са неколико студената докторских студија, помажући им у теоријском и рачунарском приступу у њиховим тезама.

Аутор је 26 радова публикованих у међународним часописима... На основу базе SCOPUS, радови су цитирани 256 пута (229 не рачунајући ауто-цитате), има h-index 9. Јелена Пешић је активан рецензент у више научних часописа (Zeitschrift für Naturforschung A - A Journal of Physical Sciences, Journal of Physics and Chemistry of Solids, Applied Nanoscience, Annalen der Physik, Physica B: Physics of Condensed Matter). Јелена Пешић је учествовала је у изради мастер тезе, а тренутно је ментор докторске тезе маг. Андријане Шолајић под именом "Испитивање утицаја напрезања на особине хетероструктура дводимензионалних монохалкогенида IIIa групе ab-initio методама" на Физичком Факултету Универзитета у Београду. У марту 2020. Јелена је имала Еразмус+ наставну посету Универзитету Јоханес Кеплер, Линц Аустрија. Од марта 2023 води стручну праксу на Институту за физику у Београду, за студента Физичког факултета, Ленку Филиповић. Ко-супервизор је мастер тезе студента Макса Хофингера у оквиру Мастер програма Нанонауке и Технологије, на Институту за физику полупроводника и чврстог стања, Јоханес Кеплер Универзитет у Линцу, Аустрија.

3. ПРЕГЛЕД НАУЧНЕ АКТИВНОСТИ

Фокус истраживања др Јелене Пешић у досадашњем раду био је усмерен на теоријско изучавање својстава различитих 2Д и слојевитих материјала коришћењем ab-initio метода заснованих на теорији функционала густине (ДФТ).

У периоду **након претходног избора у звање** њена научно-истраживачка активност може се поделити у три целине:

- 3.1. 2Д материјали и хетероструктуре
- 3.2. Утицај напрезања у 2Д материјалима
- 3.3. Динамика решетке у квази-2Д материјалима

3.1. 2Д материјали и хетероструктуре

- Ван дер Ваалсове хетероструктуре

Откриће графена, 2Д моноатомског слоја атома угљеника распоређених у саћасту решетку, отворило је ново поље истраживања дводимензионалних (2Д) материјала. Након открића графена и других 2Д материјала фокус научне заједнице се пренео ка ван дер Валсовим хетероструктурама, материјалима добијеним слагањем два или више различитих 2Д материјала, повезаних ван дер Валсовом интеракцијом. Електронске и оптичке особине могу се подешавати избором 2Д материјала од којих су састављене, међутим највеће интересовање потиче од чињенице да новонастали материјал може имати значајно другачије особине него материјали од којих је сачињен. У оквиру овог истраживања испитиване су хетероструктуре на бази једнослојног хексагоналног бор нитрида (hBN) и једнослојних монохалкогенида IIIa групе (InTe, GaTe). Ово истраживање је део докторске тезе Маст. Андријане Шолајић на Физичком факултету, којим руководи Јелена Пешић која је осмислила тему након анализе литературе и постојећих резултата као и могућности експерименталне реализације оваквих и сличних структура. Анализирани су електронска структура и оптичке особине оваквих хетероструктура, као и утицај hBN-а на својства монохалкогенида у циљу механичке заштите осетљивих монослојева монохалкогенида подложних оксидацији при изложености ваздуху (што је примећено као велики проблем у раду са већином 2Д материјала на бази телурида, селенида, јодида...). Уочена је повећана оптичка апсорпција у УВ делу спектра приликом формирања хетероструктуре, у поређењу са монослојевима InTe и GaTe. Наставак истраживања базиран је на даљем испитивању ових и сличних хетероструктура, тј. могућности примене различитих спољашњих сила на овакве системе у циљу прецизне контроле жељених својстава материјала. Конкретно, тренутно је у фокусу испитивање примене униформног напрезања на хетероструктуре у циљу контроле ширине енергијског процепа као и оптичких својстава, као и истраживање и боље познавање фундаменталних процеса у њима – међуслојног спрезања, трансфера наелектрисања

A. Šolajić and **J. Pešić**, "Novel wide spectrum light absorber heterostructures based on hBN/In(Ga)Te" *J. Phys.: Condens. Matter* **34** 345301, (2022).

У оквиру овог истраживања изучаван је високооријентисани пиролитички графит (ХОПГ) као универзални супстрат за истраживање дводимензионалних материјала због неколико јединствених својстава као што су хемијска и температурна стабилност, интринсична висока равнoћа, могућност

поновне употребе, електрична проводљивост, једноставност употребе, доступност и побољшана адхезија дводимензионалних материјала. Коришћењем проводљиве подлоге као што је графит, показано је да ће интеракција између супстрата и 2Д материјала утицати на електронска и оптичка својства проучаваног материјала. Интеракција између материјала и ХОПГ (фактички формирање хетероструктуре на површини ХОПГ, између проучаваног 2Д материјала и графена тј површине ХОПГ), може изазвати напрезање у 2Д материјалу нанесеном на ХОПГ, дајући локализоване промене у реактивности, оптичким и електронским својствима.

T.-H. Tran, R.D Rodriguez, D. Cheshev, N. E Villa, M. A. Aslam, **J. Pešić**, A. Matković, E. Sheremet, A universal substrate for the nanoscale investigation of two-dimensional materials, Applied Surface Science, **604**, 154585, (2022).

Посебно привлачну класу слојевитих материјала представљају материјали из породице метал-фосфо-трисулфата $TMPS_3$ ($TM=Fe, Mn, Ni$), антиферромагнетни материјали са високом Ниловом температуром у масивној фази (bulk), али још увек у великој мери неистражени у 2Д стању. Предвиђено је да ће на електронску структуру и магнетна својства монослоја $TMPS_3$ драматично утицати примена напрезања/деформације, али систематске студије још увек нема, која би комбиновала експерименталне доказе и теоријска предвиђања. Током 2021 Јелена Пешић је имала истраживачки грант за пројекат који је писала у сарадњи са Јоханес Кеплер универзитетом у Линцу, Институтом за полупроводнике и физику чврстог стања. Пројекат се бави хетероструктурама $TMPS_3$ и графена, комбинованим теоријским и експерименталним приступом. Ненапрегнути $TMPS_3$ системи имају различита магнетна уређења и применом напрезања се може манипулисати са њима. Постављањем $TMPS_3$ на графен се индукује напрезање као последица неслагања решетке материјала. Коришћењем ДФТ прорачуна изучава се утицај напрезања и броја слојева у хетероструктури на електронску структуру и транспортне особине. Истраживање је још у току и публикација се очекује током ове године. Јелена Пешић је ко-супервизор студента Мастер студија, Макс Хофингер, чија теза је експериментална реализација ових хетероструктура и магнетнотранспортна мерења у оквиру програма Нанонауке и Технологије, на Институту за физику полупроводника и чврстог стања, Јоханес Кеплер Универзитет у Линцу, Аустрија.

- 2д материјали

Допирање графена као метод за модификацију жељених особина

Коришћењем ДФТа изучаване су особине графена допираног металима (литијум, баријум и калцијум, стронцијум, итербијум) по узору на интеркалирани графит. Електронске и вибрационе особине су проучаване у овим материјалима као и механичке и оптичке особине. Анализе електронских и фононских особина оваквих система индиковали су могућу појаву суперпроводности у слоју графена допираног различитим адатомима што је и показано у овим студијама. Рачунате и анализирани су еластичне константе свих структура. Резултати показују да се допирањем еластичне константе смањују за око 50% у односу на једнослојни графен, што их и даље чини супериорним у поређењу са многим сличним 2Д материјалима. Истраживање је и показало да не долази до било какве значајне промене које би довеле до смањеног квалитета оптичких особина повољних у графену.

A. Solajic, **J. Pešić**, R. Gajic, "Optical and mechanical properties and electron-phonon interaction in graphene doped with metal atoms", Optical and Quantum Electronics, vol. 52, no. 3, issn: 0306-8919, doi: 10.1007/s11082-020-02300-0 (2020).

A. Šolajić, **J. Pešić**, R. Gajić, "Ab-initio calculations of electronic and vibrational properties of Sr and Yb intercalated graphene", Optical and Quantum Electronics 50 (7), 276 (2018)

Pešić J. and Gajić R., „Ab-initio study of the optical properties of the Li-intercalated graphene and MoS₂“, Opt Quant Electron, 48:368 (2016)

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 (2016)

Pešić J., and R. Gajić. "Advantages of GPU technology in DFT calculations of intercalated graphene" Phys. Scr. T162 014027 (2014)

Теоријско предвиђање нових квазичестица у 2Д материјалима и анализа материјала које их имају

Према истраживањима др Владимира Дамљановића из Лабораторије за квантну биофотонику и сарадника Лабораторије за 2Д материјале и колега са Физичког факултета (др Милан Дамњановић, др Наташа Лазих и др Божидар Николић), показано је симетријском анализом да ниско-енергијски спектар материјала одређених типова симетрије, може бити интересантнији од Дираковог или квадратног спектра. Систематски анализирајући ефективне Хамилтонијане и дисперзије у тачкама високе симетрије са четвороструком зонском дегенерацијом, откривене су нове врсте електронских дисперзија, такозване "porphy flower" дисперзије (облик подсећа на цвет мака). Овакви типови дисперзија постоје у немагнетним дводимензионим материјалима са спин-орбитном интеракцијом који поседују неку од десет предложених 10 симетријских група. Међу материјалима који су као екслофилани у монослој кандидати за овакав тип дисперзије, налази се и слојевити BiI₄, који постоји као тродимензиони кристал и екслофира се у стабилни монослој симетрије pb21a. Методом теорије функционала густине, потврђена је стабилност једнослојног BiI₄ и изучавана су електронска својства овог материјала, која потврђују присуство тзв. Fortune Teller фермиона у тачкама високе симетрије електронске дисперзије.

V. Damljanović, N. Lazić, A. Šolajić, **J. Pešić**, B. Nikolić, & M. Damnjanović. "Peculiar symmetry-protected electronic dispersions in two-dimensional materials". Journal of Physics: Condensed Matter, 32(48), 485501. (2020).

2d Молибден-дисулфид и волфрам-дисулфид из течне фазе

Диелектрична функција је рачуната у оквиру апроксимације случајне фазе (РПА) на основу ДФТ прорачуна основног стања. Коначни циљ овог истраживања је поређење са одговарајућим експерименталним подацима на узорцима произведеним у оквиру Лабораторије за 2Д материјале. Упоредени су рачунски резултате са оптичким мерењима на нанољупцима екслофиланим ултразвучним третманом у органском растварачу високе тачке кључања и након тога окарактерисани коришћењем УВ-ВИС спектрофотометрије. Показано је да ДФТ-РПА даје добру, рачунски јефтину апроксимацију имагинарног дела диелектричне функције, довољно за карактеризацију добијених филмова.

J. Pešić, J Vujin, T Tomašević-Ilić, M Spasenović, R Gajić "DFT study of optical properties of MoS₂ and WS₂ compared to spectroscopic results on liquid phase exfoliated nanoflakes" Optical and Quantum Electronics 50 (7), 1-9 (2019)

Магнезијум-диборид монослој

Истраживање обухвата проучавање електронске и фононске слике у монослоју магнезијум-диборида, студију стабилности и симетријску анализу овог материјала коришћењем ДФТа. Показано је повећање електронске густине стања на Фермијевом нивоу у монослоју (у поређењу са масивним материјалом) и утврђена је по први пут његова стабилност под различитим напрезањима. Ове две карактеристике су кључне за побољшање електрон-фононске интеракције, што омогућава значајну механичку модификацију која повећава критичну температуру суперпроводног прелаза у овом суперпроводном 2Д материјалу.

J. Pešić, I. Popov, A. Šolajić, V. Damljanović, K. Hingerl, M. Belić, & R. Gajić, Ab initio study of the electronic, vibrational, and mechanical properties of the magnesium diboride monolayer. *Condensed Matter*, 4(2), 37. (2019).

Фазни прелази у 2Д материјалима – ДФТ приступ

Могућност да се мењају особине материјала 2D фазним прелазима који се могу изазвати спољним стимулансима, омогућава широк спектар потенцијалних примена у уређајима. Фазни прелази чврсто-чврсто се дешавају услед равнотеже ентропијских доприноса који у чврстим телима настају углавном због фонона, односно вибрације атома и електронске енергије везивања. За две различите чврсте фазе, електронска енергија везивања се мења са променом кристалне структуре, а ентропијски доприноси зависе од кристалне структуре. Помоћу ДФТ рачуна се фононска зонска структура (укључујући својствене векторе). Из фононских мода, идентификују се оне које су одговорне за структурне прелазе између фаза 2H \rightarrow 1T (тј., 1T \rightarrow 2H) (могуће путем интермедијалне симетрије заједничке за две фазе). Циљ је „омекшавање“ ових мода (тако да њихове фреквенције постану блиске нули). У вези са овим ће бити размотрене и могуће стратегије за депопулацију електрона који су повезани са „меким“ фононским модама (напрезање, светлост....) као предлог за експерименталну стратегију. Ово истраживање комбинује теоријски приступ кроз теорију група (сарадња са др Владимиром Дамљановићем) и теорију функционала густине чиме се баве Јелена Пешић и Андријана Шолајић. Истраживање је везано за сарадњу са Zentrum für Oberflächen- und Nanoanalytik на Јоханес Кеpler Универзитету у Линцу, Аустрија. Јелена Пешић је по позиву одржала два предавања на European School on Plasmonics and Phase Change Materials која је била део међународне конференције META 2022 12th International Conference on Metamaterials. Школу је организовао конзорцијум везан за пројекат PHEMTRONICS позива Хоризонт2020, који се бави овом тематиком (приложен позив), а тема предавања Јелене Пешић су били фазни прелази у 2Д материјалима и приступ анализи кроз теорију функционала густине.

Експериментално истраживање 2Д материјала

Јелена Пешић се бави механичком ексфолијацијом графена и његовом применом као заштитног слоја за наноструктуре али и применом течностно-ексфолираног графена у макроскопским применама, као проводно мастило за штампу, за флексибилну електронику, као и коришћење течних дисперзија 2Д материјала у ојачању природног дрвета за примену у конструкционим елементима. У оквиру експерименталног истраживања, Јелена Пешић је коаутор на четири публикације у међународним часописима и учествовала је на два иновациона пројекта.

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)

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)

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)

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)

Због овог вишегодишњег искуства у експерименталном раду са 2Д материјалима, Јелена Пешић учествује и у експерименталном истраживању, у прављењу узорака 2Д хетероструктура у оквиру сарадње са Институтом за физику полупроводника и чврстог стања, Јоханес Кеплер Универзитет у Линцу.

3.2. Утицај напрезања у 2д материјалима

Изучавана је могућност појачања електрон-фононске интеракције и подизање критичне температуре применом механичких модификација, тј напрезања/истезања у графену допираном алкалним металима, првенствено литијумом. Показано је да применом двоосовинског истезања, због омекшавања фононских мода, долази до појачања електрон-фононске интеракције и повећања критичне температуре до 29К. Циљ истраживања је, поред бољег разумевања суперпроводности у нискодимензионим материјалима и могућности предвиђања нових суперпроводних материјала. У оквиру ове целине проучаване су и оптичке особине монослоја графена допираног литијумом.

J. Pešić , Gajić R., Hingerl K. and Belić M., "Strain-enhanced superconductivity in Li-doped graphene", EPL 108 67005 (2014)

Проучавано је понашање нискодимензионалних материјала под напрезањем комбинованим теоријско-експерименталним приступом. Ово се односи на прорачуне електричне проводности једнодимензионалних структура под напрезањем, у оквиру Хабардовога модела, као и на *ab initio* истраживања фонона, електрон-фононске интеракције и суперпроводних својстава допираног графена и монослоја MgB₂. Разматрана су два различита експериментална приступа инжењерингу деформација у графену у вези са локалним инжењерингом деформација на једнослојним флексицама графена, као и ефекти механичког напрезања на екслолирани графен из течне фазе и промену отпорности графенских филмовима.

V Čelebonović, **J Pešić**, R Gajić, B Vasić, A Matković “Selected transport, vibrational, and mechanical properties of low-dimensional systems under strain” Journal of Applied Physics, 125, (15), 154301 (2019).

У периоду август 2020-децембар 2022., Јелена Пешић је била учесник на пројекту Фонда за науку РС у пројектном позиву ПРОМИС на пројекту др Ненада Лазаревића “Strain effects in iron chalcogenide

superconductors” који се бави изучавањем особина суперпроводника на бази гвожђа под једноосним напрезањем. Јелена Пешић се у оквиру тог пројекта бавила прорачунима на бази пертурбационе теорије функционала густине (ДФПТ) рачунајући ефекте једноосних напрезања на вибрационе моде у FeSe. Извршена је систематска рачунарска студија на масивним кристалима FeSe са применом једноосног напрезања у равни у распону од -2% до 2%, користећи формализам теорије функционала густине. Фокус је био на ефекту напрезања на константе решетке, и последичне дисторзије симетрије, на карактеристичне A_{1g} и B_{1g} моде FeSe. Ови нумерички резултати су упоређени са експерименталним подацима из Раманових мерења проучавањем тренда промена A_{1g} и B_{1g} мода са примењеним напрезањем. Пројекат је резултирао са 4 публикације, а у припреми је још једна са резултатима ових прорачуна и Раманском спектроскопијом на напрегнутим узорцима.

3.3. Динамика решетке у квази-2Д, слојевитим материјалима и полупроводницима

Истраживање нове генерације магнетних (квази)дводимензионалних материјала у оквиру Центра за физику чврстог стања и нове материјале. У радовима је анализирана кристална и магнетна структура наведених материјала, као и њихова међуповезаност. Истраживање обухвата комбиновани експериментални и теоријски приступ који за анализу и боље разумевање резултата Раманове спектроскопије користи ДФПТ прорачуне вибрационих мода материјала и њихових структурних фаза. Јелена Пешић планира и извршава прорачуне и анализира добијене податке у сарадњи са коауторима. Код Vl_3 разрешене су, контрадикторности резултата различитих експерименталних техника ревизијом кристалне структуре материјала. Код $CrSi_{0.8}Ge_{0.1}Te_3$ и $Fe_{3-x}GeTe_2$ утврђено је присуство јаке спин-фонон интеракције. Код CrI_3 проучавани су структурни фазни прелази Рамановом спектроскопијом и ДФТ прорачунима. Праћена је еволуција 1T-TaS кроз сукцесивна CDW стања. Код узорака $FeSe_{1-x}S_x$ извршена је студија Рамановог расејања која покрива цео опсег супституције код суперпроводника на бази гвожђа $FeSe_{1-x}S_x$. Студија је рађена у функцији концентрације сумпора x за $0 \leq x \leq 1$, температуре и симетрије расејања. Детаљно се анализирају све врсте побуђивања, укључујући фононе, спинове и наелектрисања. Главни циљ је био проучавање физике у околини квантне критичне тачке, где нематичка нестабилност приближила zero transition temperature, у опсегу $0,16 \leq x \leq 0,23$. Добијени експериментални резултати су у доброј сагласности са нумеричким прорачуном. У истраживању $Mn_3Si_2Te_6$ Јелена Пешић је аутор који је задужен за комуникацију и који је водио анализу и објављивање резултата. Истраживање се бави магнетним квази-2Д материјалом где постоје енергетски веома блиске магнетне фазе у конкуренцији. Температурна мерења показују сукцесивне магнетне фазне прелазе које утичу на јачину спин-фонон интеракције. ДФТ и ДФПТ прорачунима се анализирају ове магнетне фазе са фокусом на енергетски најповољнију феримагнетну фазу, и прати се динамика решетке.

1. S. Djurdjic Mijin, A. Šolajić, **J. Pešić**, Y. Liu, C. Petrovic, M. Bockstedte, A. Bonanni, Z. V. Popović, and N. Lazarević “Spin-phonon interaction and short-range order in $Mn_3Si_2Te_6$ ”, Phys. Rev. B 107, 054309, (2023).
2. N. Lazarević, A. Baum, A. Milosavljević, L. Peis, R. Stumberger, J. Bekaert, A. Šolajić, **J. Pešić**, A. Wang, M. Šćepanović, M. V. Milošević, C. Petrovic, Z. V. Popović, R. Hackl, “Evolution of lattice, spin, and charge properties across the phase diagram of $FeSe_{1-x}S_x$ ”, Physical Review B, **106**, 094510, (2022)

3. S. Djurdjic-Mijin., A. Baum, J. Bekaert, A. Šolajić, **J. Pešić**, Y. Liu, ... & N. Lazarević, "Probing charge density wave phases and the Mott transition in 1 T– TaS 2 by inelastic light scattering", *Physical Review B*, 103(24), 245133. (2021)
4. A. Milosavljević, A. Šolajić, B. Višić, M. Opačić, **J. Pešić**, Y. Liu, C. Petrovic, Z. V. Popović, N. Lazarević, Vacancies and spin–phonon coupling in CrSi_{0.8}Ge_{0.1}Te₃, *Journal of Raman Spectroscopy*, Wiley, 51, 11, 0377-0486, (2020)
5. S. Djurdjic Mijin, A. M. M. Abeykoon, A. Šolajić, A. Milosavljević, **J. Pešić**, Y. Liu, C. Petrovic, Z. V. Popović, N. Lazarević, Short-Range Order in VI₃, *Inorganic Chemistry*, vol. 59, no. 22, pp. 16265 - 16271, (2020).
6. Milosavljević, A. Šolajić, S. Djurdjic-Mijin, **J. Pešić**, B. Višić, Yu Liu, C. Petrovic, N. Lazarević, and Z. V. Popović. "Lattice dynamics and phase transitions in Fe_{3-x}GeTe₂." *Physical Review B* 99, 21: 214304. (2019)
7. S. Djurdjic-Mijin, A. Šolajić, **J. Pešić**, M. Šćepanović, Y. Liu, A. Baum, C. Petrovic, N. Lazarević, Z.V. Popović, "Lattice dynamics and phase transition in CrI₃ single crystals", *Physical Review B* 98 (10), 104307 (2018)
8. Milosavljević, A. Šolajić, **J. Pešić**, Yu Liu, C. Petrovic, N. Lazarević, Z.V. Popović, "Evidence of spin-phonon coupling in CrSiTe₃", *Physical Review B* 98 (10), 104306 (2018)

У сарадњи са колегама из Лабораторије за истраживања у области електронских материјала на ИПБ, проучаване су особине композита слојевитог квази-2Д материјала из породице МХ на бази титанијум-карбида у ПММА (Полиметил метакрилат) матрици и плазмон-фонон интеракција у полупроводним узорцима ZnSnSb₂+Mn. Истраживање титанијум-карбидног композита: Јелена Пешић је водила истраживање и анализирала податке као и нумерички анализирала добијене материјале. Како се предлаже да се титанијум-карбидни МХени користе као адитив у матрицама органских полимера за производњу нанокompозита, неопходно је узети у обзир присуство оксида и других остатака заједно са МХенским нано-љуспицама у резултатима синтезе, а самим тим и у произведеном нанокompозиту. Структурна и оптичка карактеризација овог полимерног нанокompозита титанијум карбид/ПММА који се састоји од Ti₃C₂, TiC₂ МХenes и TiC, као и TiO₂ остатака синтезе у ПММА матрици, као вишекompонентног нанокompозита. Користећи XRD, инфрацрвену и Раман спектроскопију, праћено упоредним проучавањем вибрационих својстава користећи прорачуне теорије функционалне густине, окарактерисан је овај нанокompозит.

J. Pešić, A. Šolajić, J. Mitrić, M. Gilić, I. Pešić, N. Paunović, N. Romčević, "Structural and optical characterization of titanium–carbide and polymethyl methacrylate based nanocomposite", *Opt Quant Electron* **54**, 354, (2022).

M Romcevic, N Paunovic, U Ralevic, **J. Pesic**, J Mitric, J Trajic, L Kilanski, W. Dobrowolski, I. V. Fedorchenko, S. F. Marenkin, N. Romcevic "Plasmon–Phonon interaction in ZnSnSb₂+Mn semiconductors" *Infrared Physics & Technology* 108, 103345 (2020)

4.1 Квалитет научних резултата

4.1.1 Научни ниво и значај резултата, утицај научних радова

Др Јелена Пешић је у свом досадашњем раду објавила 26 радова у међународним часописима са ISI листе, од којих 4 у категорији M21a, 10 у категорији M21, и 11 у категорији M22.

У периоду након одлуке Научног већа о предлогу за стицање претходног научног звања, др Јелена Пешић је објавила **18 научних радова** у међународним часописима са ISI листе од којих 2 у категорији M21a, 7 у категорији M21 и 8 у категорији M22 и један рад у новом часопису коме још увек није додељен ИФ.

Кандидат је учествовала на укупно 35 научних скупова (17 од утврђивања предлога за избор у звање научни сарадник)

Као пет најзначајнијих радова кандидата могу се узети (број цитата у загради, на основу базе Scopus)

1. S. Djurdjić Mijin, A. Šolajić, **J. Pešić**, Y. Liu, C. Petrovic, M. Bockstedte, A. Bonanni, Z. V. Popović, and N. Lazarević "Spin-phonon interaction and short-range order in Mn₃Si₂Te₆", Phys. Rev. B 107, 054309, (2023). **M21 (0)** <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.107.054309>
2. T.-H. Tran, R.D Rodriguez, D. Cheshev, N. E Villa, M. A. Aslam, **J. Pešić**, A. Matković, E. Sheremet, A universal substrate for the nanoscale investigation of two-dimensional materials, Applied Surface Science, **604**, 154585, (2022). **M21a (0)** <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2022.154585>
3. A. Šolajić and **J. Pešić**, "Novel wide spectrum light absorber heterostructures based on hBN/In(Ga)Te" J. Phys.: Condens. Matter **34** 345301, (2022). **M22 (0)** DOI:10.1088/1361-648X/ac7996.
4. S. Djurdjić-Mijin, A. Šolajić, **J. Pešić**¹, M. Šćepanović, Y. Liu, A. Baum, C. Petrovic, N. Lazarević, Z.V. Popović, "Lattice dynamics and phase transition in CrI₃ single crystals", Physical Review B 98 (10), 104307 (2018) **M21 (44)** <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.98.104307>
5. **J. Pešić**¹, A. Šolajić, J. Mitrić, M. Gilić, I. Pešić, N. Paunović, N. Romčević, "Structural and optical characterization of titanium-carbide and polymethyl methacrylate based nanocomposite", Opt Quant Electron **54**, 354, (2022) **M22 (1)** <https://doi.org/10.1007/s11082-022-03674-z>

1. У оквиру овог истраживања изучаван је високооријентисани пиролитички графит (ХОПГ) као универзални супстрат за истраживање дводимензионалних материјала. Коришћењем проводне подлоге као што је графит, показано је да ће интеракција између супстрата и 2Д материјала утицати на електронска и оптичка својства проучаваног материјала. Др Јелена Пешић је укључена у истраживање због њене експертизе у нумеричким симулацијама хетероструктура са графеном као и утицају напрезања у 2Д материјалима и једини је теоријски истраживач на овој публикацији. Интеракција између материјала и ХОПГ (фактички формирање хетероструктуре на површини ХОПГ, између проучаваног 2Д материјала и графена тј површине ХОПГ), може изазвати напрезање у 2Д материјалу нанесеном на ХОПГ, дајући локализоване промене у реактивности, оптичким и

¹ Corresponding author

електронским својствима, што је једна од тема којом је кандидат бави већ дужи низ година. Кандидат је учествовала у писању рада, анализи литературе и дискусији резултата са другим коауторима. Истраживање је започето за време посете др Јелене Пешић Аустрији током истраживачког пројекта на Јоханес Кеплер Универзитету и настављено након њеног повратка у Београд.

2. Ово истраживање је део докторске тезе маг. Андријане Шолајић на Физичком факултету, којим руководи Јелена Пешић која је осмислила тему након анализе литературе и постојећих резултата као и могућности експерименталне реализације оваквих и сличних структура. У оквиру овог истраживања испитују се хетероструктуре на бази једнослојног хексагоналног бор нитрида (hBN) и једнослојних монохалкогенида IIIa групе (InTe, GaTe). Електронске и оптичке особине могу се подешавати избором 2Д материјала од којих су састављене, међутим највеће интересовање потиче од чињенице да новонастали материјал може имати значајно другачије особине него материјали од којих је сачињен. У овом раду изучава се електронска структура и оптичке особине оваквих хетероструктура, као и утицај hBN-а на својства монохалкогенида у циљу механичке заштите осетљивих монослојева монохалкогенида подложних оксидацији при изложености ваздуху. Ово је примећено као велики проблем у раду са већином 2Д материјала на бази телурида, селенида, јодида... Уочена је повећана оптичка апсорпција у УВ делу спектра приликом формирања хетероструктуре, у поређењу са монослојевима InTe и GaTe.
3. У истраживању $Mn_3Si_2Te_6$, слојевитог магнетног материјала са ван дер Ваалсовом интеркацијом међу слојевима, Јелена Пешић је аутор који је водио нумеричке прорачуне, анализу и објављивање резултата и такође је аутор задужен за комуникацију. Заједно са Андријаном Шолајић, бави се целокупним теоријским аспектом овог истраживања. Истраживање се бави магнетним квази-2Д материјалом у ком су присутне енергетски веома блиске магнетне фазе, које су у конкуренцији. Иако је овај материјал познат преко тридесет година, свега неколико публикација о њему је било до претходних неколико година. Температурна мерења показују сукцесивне магнетне фазне прелазе које утичу на јачину спин-фонон интеракције. ДФТ иДФПТ прорачунима се анализирају ове магнетне фазе са фокусом на енергетски најповољнију феримагнетну, и прати се динамика решетке. Због ових магнетних блиских фаза и деликатном балансу између њих, велика пажња је била неопходна код нумеричких симулација да би се адекватно описало понашање материјала.
4. У оквиру ове публикације истраживан је слојевити материјал трихалид прелазног метала, повезан ван дер Валсовом интеракцијом, Crl_3 и његови структурни фазни прелазни комбинованим теоријско-експерименталним приступом, ДФТ прорачуна са Рамановом спектроскопијом. Ово се показало као јако добар приступ за истраживање материјала из породице трихалида. Др Јелена Пешић се бавила нумеричким симулацијама ових материјала истражујући структурни фазни прелаз и заједно са Андријаном Шолајић се бави целокупном теоријском анализом. Потврђен је структурни фазни прелаз првог реда у хром-јодиду из нискотемпературске ромбодарске $\bar{R}3$ структуре у високотемпературску моноклиничну $C2/m$ структуру, а експериментално је показано да се то дешава на температури нижој од оне која се помиње у стручној литератури. Спектри добијени на запреминским кристалима хром-јодида не указују на претходно пријављену коегзистенцију нискотемпературске и високотемпературске фазе.

5. У овом истраживању титанијум-карбидног нанокompозита, др Јелена Пешић је водила истраживање и анализирала податке као и нумерички анализирала добијене материјале и била је аутор задужен за комуникацију. Кандидат је први аутор на овој публикацији. Проучаване су особине композита слојевитог квази-2Д материјала из породице МХена на бази титанијум-карбида у ПММА (Полиметил метакрилат) матрици. Како се предлаже у стручној литератури, титанијум-карбидни МХ-ени се могу користити као адитиви у матрицама органских полимера за производњу нанокompозита. МХ-ени су породица дводимензионалних карбида прелазних метала али њихова ексфолијација, за разлику од других 2Д материјала, захтева и поступак деламинације и хемијског третмана, последично, неопходно је узети у обзир оксиде и друге остатаке и нечистоће, који могу остати присутни у нанокompозиту, заједно са МХенским нано-љуспицама као резултат процеса синтезе. У овом истраживању је извршена структурна и оптичка карактеризација овог полимерног нанокompозита на бази титанијум карбид и ПММА, који се састоји од Ti_3C_2 , TiC_2 МХена и TiC , као и TiO_2 остатака синтезе у ПММА матрици, резултујући у вишекомпонентним нанокompозитом. Користећи XRD, инфрацрвену и Раман спектроскопију, праћено упоредним проучавањем вибрационих својстава свих конституционих материјала, користећи прорачуне теорије функционалне густине, окарактерисан је овај нанокompозит. Кандидат је објединила све експерименталне резултате и упоредила их са нумеричким резултатима, комплетирајући комплексну слику о добијеном нанокompозиту.

4.1.2 Позитивна цитираност научних радова кандидата

Радови др Пешић су до сада цитирани 319 пута уз h индекс 9 и i10 индекс 9 (Google Scholar), односно 254 од којих 229 без аутоцитата уз h индекс 9 (Scopus). Сумирано 7. марта 2023.

Доказ у прилогу.

4.1.3 Параметри квалитета часописа

У досадашњој каријери др Пешић је публиковала 26 научних чланака од чега 14 (M21a и M21), 11 у M22 и један у новом часопису коме још увек није додељен импакт фактор. У периоду након претходног избора у звање публиковала је 18 научних чланака, од којих 2 M21a, 7 M21, 8 M22 и један у часопису без ИФ, са укупних ИФ=58,905. У току каријере, укупан ИФ је 89.244.

	ИФ	М	СНИП
Укупно	58.905	116	16.54
Усредњено по чланку	3.465	6.823	0.973
Усредњено по аутору	9.220	18.133	2.748

У прилогу је листа научних радова са одговарајућом категоријом и ИФ.

Број радова након одлуке Научног већа о предлогу за стицање претходног научног звања

- 1 рад у *Applied Surface Science* **M21a** (ИФ = 7.392)
- 1 рад у *Inorganic Chemistry* **M21a** (ИФ = 5.165)

- 6 радова у *Physical Review B* **M21** (ИФ = 4.036 три рада, ИФ = 3,813 један рад, ИФ = 3,836 два рада)
- 1 рад у *Journal of Raman Spectroscopy* **M21** (ИФ = 3.133)
- 2 рада у *Journal of Physics: Condensed Matter* **M22** (ИФ = 3,466 и ИФ = 2,923)
- 4 рада у *Optical and Quantum Electronics* **M22** (ИФ = 2,794 ИФ = 2,084 ИФ = 1,842 ИФ = 1,574)
- 1 рад у *Infrared Physics and Technology* **M22** (ИФ = 2,638)
- 1 рад у *Journal of Applied Physics* **M22** (ИФ = 3.328)
- 1 рад у *MDPI Condensed Matter* –нов часопис без ИФ

4.1.4 Степен самосталности и степен учешћа у реализацији радова у научним центрима у земљи и иностранству

Кандидат је водећи аутор на 7 радова а на радовима који су објављени у периоду након избора у претходно звање, кандидат је водећи аутор на 3 рада и последњи аутор на једном, где је осмислила и дефинисала правац истраживања. С обзиром да радови који су везани за докторске дисертације на којима се сада ради још нису публиковани, очекује се још оваквих радова.

Кандидат је показала висок степен самосталности у току израде свих објављених радова. Све прорачуне везане за радове урађене на Институту за физику у Београду кандидат је извршио самостално, уз то активно радећи на формирању новог научног кадра, а у великој мери је и допринео интерпретацији резултата на свим радовима где је учествовала као коаутор. Конкретан допринос кандидата у 5 најзначајнијих радова у изборном периоду наведен је у одељку 4.1.1, а у одељку 3 је наведен конкретан допринос кандидата у оквиру истраживачких тема којима се бавила.

Кандидат је учествовала у организацији више међународних скупова. Др Јелена Пешић је учествовала у организацији 3 међународна научна скупа у Београду (2 конференције и радионица). У току подношења овог извештаја Јелена Пешић је председник Организационог одбора за конференцију Симпозијум Физике Кондензоване Материје (СФКМ) која ће се одржати у Београду у јуну 2023. *Докази у прилогу.*

У Центру за физику чврстог стања и нове материјале кандидат води теоријска истраживања на 2Д и квази-2Д слојевитим материјалима, активно ради са неколико студената докторских студија, помажући им у теоријском и рачунарском приступу у њиховим тезама. Кандидат је предводила теоријско истраживање у оквиру ПРОМИС пројекта Фонда за науку којим је руководио др Ненад Лазаревић. Са сарадником Андријаном Шолајић, студентом докторских студија, радила је све нумеричке прорачуне у оквиру овог пројекта.

Кандидат је учествовала у изради једне мастер тезе, именована је за ментора једне докторске тезе, оба на Универзитету у Београду и ко-супервизор је на једној мастер тези на Јоханес Кеплер Универзитету у Линцу, Аустрија. *Докази у прилогу.*

У периоду 2018-2021 кандидат је руководио пројектом билатералне сарадње Министарства Просвете Науке и Технолошког развоја у програму сарадње Србије и Аустрије. *Докази у прилогу.*

У 2021. години је имала истраживачки грант Аустријске Академије Наука, и током боравка у Лабораторији за квантне материјале (Q MAG), Институт за полупроводнике и физику чврстог стања, Јоханес Кеплер Универзитет, самостално је радила на теоријском истраживању хетероструктура метал фосфо-трисулфата и графена и магнетизму и напрезању у овим материјалима. *Докази у прилогу.*

Јелена Пешић предводи сарадњу са Јоханес Кеплер Униерзитетом у Линцу, активно сарађујући са неколико истраживачких института и заједнички конкурише са колегама из тих институција на пројектним позивима Европске Комисије у оквиру Хоризонт позива као и другим пројектним позивима. Резултати се очекују током 2023.

4.1.5. Елементи применљивости научних резултата

Научно-истраживачке активности др Јелене Пешић су усмерене на теоријско изучавање и нумеричке симулације 2Д и квази-2Д материјала и могућност модификовања њихових особина у циљу могућности употребљавања тих материјала у апликацијама са великим потенцијалима примене у различитим областим (наноелектроника, straintronics, материјали за меморије, материјали за конверзију и чување енерије, оптички материјали...).

Поред тога кандидат је радила на иновационим пројектима („Функционална мастила на бази графена и штампање радио-фреквентних идентификатора“, “Дрво ојачано наноматеријалима за конструкционе елементе“) који су за циљ имали конкретне производе (мастила на бази графена и њиме штампани радио-фреквентни идентификатори и дрвени елементи ојачани наноматеријалима). Оба пројекта користе течне дисперзије 2Д материјала које су добијене у Лабораторији за 2Д материјале у истраживању које воде др Ивана Милошевић и др Тијана Томашевић-Илић, као и студент докторских студија Јасна Вујин. Др Јелена Пешић ради на анализи резултата пројекта и активно учествују у развоју стратегије за даље унапређење истраживања и производа као и у администрацији пројеката.

4.2 Ангажованост у формирању научних кадрова

Кандидат је учествовала у изради једне мастер тезе (Андријана Шолајић) именована је за ментора једне докторске тезе (Андријана Шолајић), оба на Универзитету у Београду. Јелена Пешић активно сарађује са Андријаном Шолајић од 2017 године, не само на изради њене докторске тезе којом руководи, већ и на осталим пројектима у оквиру Лабораторије за 2Д материјале и Центра за физику чврстог стања и нове материјале.

Кандидат је такође учествовала на формирању научних кадрова у иностранству. Ко-супервизор је на једној мастер тези (Макс Хофингер) на Јоханес Кеплер Универзитету 2022-2023, у Линцу, Аустрија. *Докази у прилогу.*

У марту 2020. Јелена је имала Еразмус+ наставну посету по позиву на Универзитету Јоханес Кеплер, Линц Аустрија. Одржала је 4 предавања и семинара у току летњег семестра, у периоду од 2. до 6 марта 2020, на тему ДФТ прорачуна у 2Д материјалима, особине материјала и динамика решетке као и уводно предавање са основама ДФТ. *Докази у прилогу.*

Др Јелена Пешић је по позиву одржала два предавања на Европској школи и радионици „European School on Plasmonics and Phase Change Materials“ која је била део међународне конференције META 2022 - 12th International Conference on Metamaterials, која је одржана у Торемолиносу, Шпанија у јулу 2022. Тема предавања Јелене Пешић су били фазни прелази у 2Д материјалима и приступ анализи кроз теорију функционала густине.

Др Јелена Пешић је била ангажована као тотор у оквиру „Летња школа о напредним материјалима и молекуларном моделовању“ у септембру 2019 у Љубљани, Словенија. *Докази у прилогу*

Од марта 2023 кандидат води стручну праксу на Институту за физику у Београду, за студента Физичког факултета, Ленку Филиповић.

4.3 Нормирање броја коауторских радова, патената и техничких решења

Природа, као и сама комплексност истраживања, најчешће је захтевала учешће истраживача из различитих група. Укупан број М бодова из категорија М20 публикација, пре нормирања је 116, а када се узме у обзир број аутора, укупан број је смањен на 90.611. Радови где је кандидат коаутор су највише теоријско-експериментални, што резултира већим бројем аутора. Део радова спада у категорију радова са нумеричким симулацијама који се признају са пуним бројем М бодова до пет коаутора. Вредности бодова након нормирања приказани су у листи публикација за сваки рад појединачно.

4.4 Руковођење пројектима, потпројектима и пројектним задацима

У периоду 2018-2021 кандидат је руководила пројектом билатералне сарадње 451-03-02141/2017-09/31 Министарства Просвете Науке и Технолошког развоја у програму сарадње Србије и Аустрије, под насловом „Моделовање и мерење фазних прелаза и оптичких особина код перовскита“. *Докази у прилогу.*

2021 години је имала истраживачки пројекат и грант Аустријске Академије Наука у оквиру програма JESH (Joint Excellence in Science and Humanities). Током боравка у Лабораторији за квантне материјале (QMAG), Институт за полупроводнике и физику чврстог стања, Јоханес Кеплер Универзитет, самостално је радила на теоријском истраживању хетероструктура метал фосфо-трисулфата и графена и магнетизму и напрезању у овим материјалима у оквиру пројекта „Strain-driven effects on magnetic interactions and optical recombinations in 2D layered systems“. *Докази у прилогу.*

У периоду од августа 2020 до краја децембра 2022. године учествовала је на пројекту Фонда за науку Републике Србије у позиву ПРОМИС: „StrainedFeSC-Strain effects in iron chalcogenide superconductors“ под руководством др Ненада Лазаревића, где је водила више пројектних задатака.

У оквиру Центра за физику чврстог стања и нове материјале води теоријски правац истраживања нове генерације магнетних (квази)дводимензионалних материјала где планира и извршава прорачуне и анализира добијене податке у сарадњи са експерименталним истраживачима.

4.5 Активност у научним и научно-стручним друштвима

Кандидат је рецензент у следећим научним часописима: *Annalen der Physik, Applied Nanoscience, Physica B, Surface Science...* Докази у прилогу

Јелена Пешић је учествовала у организацији 3 међународна научна скупа у Београду (2 конференције и радионица). У току подношења овог извештаја Јелена Пешић је председник Организационог одбора за конференцију Симпозијум Физике Кондензоване Материје (СФКМ) која ће се одржати у Београду у јуну 2023. Докази у прилогу

4.6 Утицајност научних резултата

Видети 4.1.2, 4.1.3 и 4.1.5

4.7 Конкретан допринос кандидата у реализацији радова у научним центрима у земљи и иностранству

Кандидат је дала значајан допринос свим објављеним радовима. Често је предлагала метод и правац истраживања и учествовала је у прорачунима и интерпретацији резултата. Конкретни доприноси кандидата најистакнутијим радовима након избора у претходно звање дати су у одељку 4.1.1, а у одељку 3 је наведен конкретан допринос кандидата у оквиру истраживачких тема којима се бави.

Др Јелена Пешић се активно бави иновационом делатношћу у оквиру Лабораторије за 2Д материјале. Учествовала је на два иновациона пројекта. Током 2014. и 2015. године учествовала је на иновационом пројекту под називом „Функционална мастила на бази графена и штампање радио-фреквентних идентификатора“ који се фокусирао на коришћење течне дисперзије графена као мастила за штампање флексибилне електронике. У периоду 2020-2021. учествује на пројекту позива Доказ концепта, Фонда за иновациону делатност, Република Србија - ИД пројекта 5574 “Дрво ојачано наноматеријалима за конструкционе елементе” Докази у прилогу

Др Јелена Пешић предводи сарадњу са Јоханес Кеплер Универзитетом у Линцу, активно сарађујући са неколико истраживачких института и заједнички конкурише са колегама из тих институција на пројектним позивима Европске Комисије у оквиру Хоризонт позива као и другим пројектним позивима. Резултати се очекују током 2023.

Са колегама др Владимиром Дамљановићем и Андријаном Шолајић сарађује са Zentrum für Oberflächen- und Nanoanalytik на Јоханес Кеплер Универзитету у Линцу на новом приступу структурним фазним прелазима комбинујући ДФТ са теоријом група и термодинамичким приступом, у циљу примене на 2Д материјале али и високо-ентропијске легуре.

4.8 Уводна предавања на конференцијама и друга предавања

Др Јелена Пешић је по позиву одржала два предавања на European School on Plasmonics and Phase Change Materials која је била део међународне конференције META 2022 12th International Conference on Metamaterials која је одржана у Торемолиносу, Шпанија, у јулу 2022. Тема предавања

др Јелена Пешић су били фазни прелази у 2Д материјалима и приступ анализи кроз теорију функционала густине. *Докази у прилогу*

У марту 2020. Јелена је имала Еразмус+ наставну посету по позиву на Универзитету Јоханес Кеплер, Линц Аустрија. Одржала је 4 предавања и семинара у периоду од 2. до 6 марта 2020 на тему ДФТ прорачуна у 2Д материјалима, особине материјала и динамика решетке, као и уводно предавање са основама ДФТ-а. *Докази у прилогу*

Јелена Пешић је одржала предавање у Центру за изучавање површина и наноаналитику (ZONA) на Универзитету Јоханес Кеплер у Линцу у Октобру 2018 на тему теоријског и експерименталног истраживање 2Д материјала у Лабораторији за 2Д материјале. *Докази у прилогу*

На Радионици у јуну 2022 која је организирана у оквиру ПРОМИС пројекта „Strain effects in iron chalcogenide superconductors“, др Јелена Пешић је одржала предавање „First Principle Study Of Evolution Of Vibrational Modes Of FeSe Under Uniaxial Strain“.

У периоду од претходног избора у звање кандидат је одржала неколико предавања на домаћим и иностраним конференцијама - *Наведено у прилогу.*

5. ЕЛЕМЕНТИ ЗА КВАНТИТАТИВНУ ОЦЕНУ НАУЧНОГ ДОПРИНОСА КАНДИДАТА

Остварени резултати у периоду након одлуке Научног већа о предлогу за стицање претходног научног звања:

Категорија	М бодова по раду	Број радова	Укупно М бодова	Нормирани број М бодова
M21a	10	2	20	15,476
M21	8	7	56	38,190
M22	5	8	40	36,944
M32	1,5	1	1,5	1,5
M34	0,5	15	7,5	7,5
M64	0,2	1	0,2	0,2

Поређење са минималним квантитативним условима за избор у звање научно звање:

Минимални број М бодова	Неопходно	Остварено, број М бодова без нормирања	Остварено, нормирани број М бодова
Укупно	50	125,2	99.811
M10+M20+M31+M32+M33+M41+M42+M90	40	117,5	92,111
M11+M12+M21+M22+M23	30	116	90,611

Према бази Scopus, укупан број цитата је 254, док је број цитата без аутоцитата 229, а Хиршов индекс радова кандидата је 9

Списак публикација кандидата

Са ** су означени радови објављени након одлуке Научног већа Института за Физику Београд о утврђивању предлога за претходни избор у звање.

РАДОВИ У МЕЂУНАРОДНИМ ЧАСОПИСИМА ИЗУЗЕТНИХ ВРЕДНОСТИ (M21A):

1. **Т.-Н. Tran, R.D Rodriguez, D. Cheshev, N. E Villa, M. A. Aslam, **J. Pešić**, A. Matković, E. Sheremet, „A universal substrate for the nanoscale investigation of two-dimensional materials, Applied Surface Science, **604**, 154585“, (2022). **ИФ = 7,392 M_{норм} = 8,333**
2. **S. Djurdjic Mijin, A. M. M. Abeykoon, A. Šolajić, A. Milosavljević, **J. Pešić**, Y. Liu, C. Petrovic, Z. V. Popović, N. Lazarević, Short-Range Order in VI3, Inorganic Chemistry, vol. 59, no. 22, pp. 16265 - 16271, doi: 10.1021/acs.inorgchem.0c02060, (2020). **ИФ = 5,165 M_{норм} = 7,142**
3. 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)
4. 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, Small 12 (39), 5458-5467, (2016)

РАДОВИ У ВРХУНСКИМ МЕЂУНАРОДНИМ ЧАСОПИСИМА (M21):

1. **S. Djurdjic Mijin, A. Šolajić, **J. Pešić**, Y. Liu, C. Petrovic, M. Bockstedte, A. Bonanni, Z. V. Popović, and N. Lazarević “Spin-phonon interaction and short-range order in Mn3Si2Te6”, Phys. Rev. B 107, 054309, (2023). **ИФ = 4,036 M_{норм} = 5,714**
2. **N. Lazarević, A. Baum, A. Milosavljević, L. Peis, R. Stumberger, J. Bekaert, A. Šolajić, **J. Pešić**, A.Wang, M. Šćepanović, M. V Milošević, C. Petrovic, Z. V Popović, R. Hackl, “Evolution of lattice, spin, and charge properties across the phase diagram of FeSe1-xSx”, Physical Review B, **106**, 094510, (2022) **ИФ = 4,036 M_{норм} = 3,333**
3. **S Đurđić Mijin, A Baum, J Bekaert, A Šolajić, J Pešić, Y Liu, Ge He, MV Milošević, C Petrovic, ZV Popović, R Hackl, N Lazarević, „Probing charge density wave phases and the Mott transition in 1 T– TaS 2 by inelastic light scattering”, Physical Review B, 103(24), 245133. (2021) **ИФ = 4,036 M_{норм} = 4**
4. **A. Milosavljević, A. Šolajić, B. Višić, M. Opačić, **J. Pešić**, Y. Liu, C. Petrovic, Z. V. Popović, N. Lazarević, Vacancies and spin–phonon coupling in CrSi0.8Ge0.1Te3, Journal of Raman Spectroscopy, Wiley, 51, 11, 0377-0486, 10.1002/jrs.5962, (2020) **ИФ = 3,133 M_{норм} = 5,714**
5. **A. Milosavljević, A. Šolajić, S. Djurdjic-Mijin, **J. Pešić**, B. Višić, Yu Liu, C. Petrovic, N. Lazarević, and Z. V. Popović. "Lattice dynamics and phase transitions in Fe3-xGeTe2." Physical Review B 99, no. 21: 214304. (2019) **ИФ = 3,813 M_{норм} = 5,714**
6. **A. Milosavljević, A. Šolajić, **J. Pešić**, Yu Liu, C. Petrovic, N. Lazarević, Z.V. Popović, "Evidence of spin-phonon coupling in CrSiTe3", Physical Review B 98 (10), 104306 (2018) **ИФ = 3,836 M_{норм} = 8**
7. **S. Djurdjic-Mijin, A. Šolajić, **J. Pešić**, M. Šćepanović, Y. Liu, A. Baum, C. Petrovic, N. Lazarević, Z.V. Popović, "Lattice dynamics and phase transition in CrI3 single crystals", Physical Review B 98 (10), 104307 (2018) **ИФ = 3,836 M_{норм} = 5,714**
8. 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)
9. Pešić J. , Gajić R., Hingerl K. and Belić M., "Strain-enhanced superconductivity in Li-doped graphene", EPL 108 67005 (2014)

10. 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**):

1. **A. Šolajić and **J. Pešić**, “Novel wide spectrum light absorber heterostructures based on hBN/In(Ga)Te” *J. Phys.: Condens. Matter* **34** 345301, (2022). **ИФ = 3,466 M_{НОРМ} = 5**
2. ****J. Pešić**, A. Šolajić, J. Mitrić, M. Gilić, I. Pešić, N. Paunović, N. Romčević, “Structural and optical characterization of titanium–carbide and polymethyl methacrylate based nanocomposite”, *Opt Quant Electron* **54**, 354, (2022). **ИФ = 2,794 M_{НОРМ} = 5**
3. **A. Solajic, **J. Pesic**, R. Gajic, “Optical and mechanical properties and electron-phonon interaction in graphene doped with metal atoms”, *Optical and Quantum Electronics*, vol. 52, no. 3, issn: 0306-8919, doi: 10.1007/s11082-020-02300-0 (2020). **ИФ = 2,084 M_{НОРМ} = 5**
4. **V. Damljanović, N. Lazić, A. Šolajić, **J. Pešić**, B. Nikolić, & M. Damjanović. “Peculiar symmetry-protected electronic dispersions in two-dimensional materials”. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 32(48), 485501. (2020). **ИФ = 2,923 M_{НОРМ} = 4,167**
5. **M Romcevic, N Paunovic, U Ralevic, **J Pesic**, J Mitric, J Trajic, L Kilanski, W. Dobrowolski, I. V. Fedorchenko, S. F. Marenkin, N. Romcevic “Plasmon–Phonon interaction in ZnSnSb2+ Mn semiconductors” *Infrared Physics & Technology* 108, 103345 (2020) **ИФ = 2,638 M_{НОРМ} = 2,778**
6. **V Čelebonović, **J Pešić**, R Gajić, B Vasić, A Matković “Selected transport, vibrational, and mechanical properties of low-dimensional systems under strain” *Journal of Applied Physics* 125 (15), 154301 (2019). **ИФ = 2,328 M_{НОРМ} = 5**
7. ****J Pešić**, J Vujin, T Tomašević-Ilić, M Spasenović, R Gajić “DFT study of optical properties of MoS₂ and WS₂ compared to spectroscopic results on liquid phase exfoliated nanoflakes” *Optical and Quantum Electronics* 50 (7), 1-9 (2019) **ИФ = 1,842 M_{НОРМ} = 5**
8. **A. Šolajić, **J. Pešić**, R. Gajić, "Ab-initio calculations of electronic and vibrational properties of Sr and Yb intercalated graphene", *Optical and Quantum Electronics* 50 (7), 276 (2018) **ИФ = 1,547 M_{НОРМ} = 5**
9. 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)
10. **Pešić J.** and Gajić R., „Ab-initio study of the optical properties of the Li-intercalated graphene and MoS₂“, *Opt Quant Electron*, 48:368 (2016)
11. **Pešić J.**, and R. Gajić. "Advantages of GPU technology in DFT calculations of intercalated graphene" *Phys. Scr.*T162 014027 (2014)

РАДОВИ У НОВИМ МЕЂУНАРОДНИМ ЧАСОПИСИМА КОЈИМ ЈОШ УВЕК НИЈЕ ДОДЕЉЕН ИФ

1. ****J. Pešić**, I. Popov, A. Šolajić, V. Damljanović, K. Hingerl, M. Belić, & R. Gajić Ab initio study of the electronic, vibrational, and mechanical properties of the magnesium diboride monolayer. *Condensed Matter*, 4(2), 37. (2019).

ПРЕДАВАЊЕ ПО ПОЗИВУ СА МЕЂУНАРОДНОГ СКУПА ШТАМПАНО У ИЗВОДУ (**M32**):

**J. Pešić „Density functional theory calculations for PCM: basic concepts and applications” *Challenges of Phase Change Materials and Plasmonics for Nanophotonics - School on Phase Change Materials*, Torremolinos, Malaga, Spain, 17-18 July (2022)

САОПШТЕЊЕ СА МЕЂУНАРОДНОГ СКУПА ШТАМПАНО У ИЗВОДУ (M34):

1. ** M. Hofinger, J. Pešić, K. Burgholzer, J. Salchegger, R. Adhikari, M. Bockstedte, A. Bonanni, Electronic transport in 2D NiPS₃ on graphene, 22nd International Winterschool on New Developments in Solid State Physics, 12-17 February 2023, Mauterndorf, Austria, Book of Abstract p 142.
2. **J.Pesic. Lattice Dynamics in Ferrimagnetic Layered van der Waals Material Mn₃Si₂Te₆ International Workshop: "Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP) Ecosystem" - 6 – 7 February 2023, Evora, Portugal, Book of abstract p 4
3. **Jelena Pešić, Andrijana Šolajić, Ana Milosavljević, Nenad Lazarević The Evolution Of Vibrational Modes Of Fese Under Uniaxial Strain "21th International Workshop on Computational Physics and Materials Science: Total Energy and Force Methods" January 11-13, 2023. ICTP, Trieste, Italy Booklet of Abstracts P83
4. **J. Pešić, A. Šolajić, J. Mitrić, M. Gilić, I. Pešić, N. Paunović, N. Romčević, Structural and Optical Characterization of titanium-carbide and polymethyl methacrylate based nanocomposite, PHOTONICA2021, VIII International School and Conference on Photonics, August 23 - August 27, 2021, Belgrade, Serbia, ISBN 978-86-82441-53-3, p78, Beograd
5. **A. Solajic and J. Pesic , "Novel hBN/In(Ga)Te Heterostructures For Wide Spectrum Light Absorbers", The International Symposium on Nanoscale Research September 20th-21st, 2021, Montanuniversitaet Leoben, Austria
6. ** J. Pesic, A. Šolajić, Strain effects on vibrational properties in hexagonal 2D materials from the first principles – doped graphene and MgB₂- monolayer, Book of abstracts –Mauterndorf 2020, 21st International Winterschool, New Developments in Solid State Physis, Mauterndorf, Mauterndoft, Salzburg, Austria, 23. - 28. Feb, 2020
7. ** S. Djurdjic-Mijin, J. Bekaert, A. Šolajić, J. Pešić, Y. Liu, M. V. Milosevic, C. Petrovic, N. Lazarević, and Z. V. Popović, Probing subsequent charge density waves in 1T-TaS₂ by inelastic light scattering, Eighteenth Young Researchers Conference-Materials Science and Engineering December 4-6, 2019, Belgrade, Serbia, p.44. M34
8. ** Ana Milosavljević, A. Šolajić, J. Pešić, B. Višić, M. Opačić, Yu Liu, C. Petrovic, N. Lazarević, Z. V. Popović, Spin-phonon coupling in CrSiTe₃ and CrSi_{0.8}Ge_{0.1}Te₃, Eighteenth Young Researchers Conference – Materials Science and Engineering December 4-6, 2019, Belgrade, Serbia, p.64. M34
9. ** S. Djurdjic-Mijin, A. Šolajić, J. Pešić, M. Šćepanović, Y. Liu, A. Baum, C. Petrovic, N. Lazarević and Z. V. Popović, Raman Spectroscopy Study on phase transition in CrI₃ single crystals, Seventeenth Young Researchers Conference – Materials Science and Engineering, December 5-7, 2018, Belgrade, Serbia, p.70. M34
10. **A. Šolajić, J. Pešić, R. Gajić, Optical and mechanical properties and electron-phonon interaction in graphene doped with metal atoms, PHOTONICA2019: The Seventh International School and Conference on Photonics, 26 August – 30 August 2019, Belgrade, Serbia, Vinča Institute of Nuclear Sciences, pp. 106 - 106, isbn: 978-86-7306-153-5, Београд, 26. Aug - 30. Sep, 2019

11. **A. Milosavljević, A. Šolajić, S. Djurdjić Mijin, J. Pešić, B. Višić, Y. Liu, C. Petrovic, N. Lazarević, Z. V. Popović, Lattice dynamics and phase transitions in $\text{Fe}_{3-x}\text{GeTe}_2$, The 20th Symposium on Condensed Matter Physics BOOK OF ABSTRACTS, pp. 84 - 84, Beograd, 7. - 11. Oct, 2019
12. **A. Šolajić, J. Pestic, Electron-phonon interaction and superconductivity in graphene doped with metal atoms, BOOK OF ABSTRACTS: Quantum ESPRESSO Summer School on Advanced Materials and Molecular Modelling, Jožef Stefan Institute, Jamova 39, Ljubljana, Slovenia, pp. 16 - 16, isbn: 978-961-264-154-2, Ljubljana, 15. - 20. Sep, 2019
13. **J. Pestic, A. Solajic, Computational study of vibrational properties of chemically exfoliated titanium carbide MXenes - Ti_3C_2 and TiC_2 , BOOK OF ABSTRACTS: Quantum ESPRESSO Summer School on Advanced Materials and Molecular Modelling, Jožef Stefan Institute, Jamova 39, Ljubljana, Slovenia, vol. 1, no. 1, pp. 16 - 16, issn: 301641728, isbn: 978-961-264-154-2, Ljubljana, Slovenia, 15. - 20. Sep, 2019
14. **J. Pestic, A. Solajic, R. Gajic, Strain effects on vibrational properties in hexagonal 2D materials from the first principles – doped graphene and MgB_2 - monolayer study, Knjiga Abstrakata - Simpozijum Fizike Kondenzovane Materije, pp. 69 - 69, Beograd, Srbija, 7. - 11. Oct, 2019
15. ** J. Pešić, A. Šolajić, Electron-Phonon Interaction in Monolayer MgB_2 from the First Principles, School on Electron-Phonon Physics from First Principles, International Centre for Theoretical Physics (ICTP), Trieste, Italy, 19. - 23. Mar, 2018
16. Šolajić, J. Pešić, R. Gajić, "First principle study of Yb and Sr doped monolayer graphene", Program and the Book of Abstracts / Sixteenth Young Researchers' Conference Materials Sciences and Engineering, December 6-8, 2017, Beograd, Srbija, str 27., ISBN 978-86-80321-33-2
17. J. Pešić, J. Vujin, T. Tomašević-Ilić, M. Spasenović, R. Gajić "Ab-initio study of optical properties of MoS_2 and WS_2 compared to spectroscopic results of liquid phase exfoliated nanoflakes", Photonica 2017, 28.8 - 1.9.2017, Beograd, Srbija, ISBN 978-86-82441-46-5, str.94
18. T. Tomasević-Ilić, Đ. Jovanović, J. Pešić, A. Matković, M. Spasenović, R. Gajić "Enhancing conductivity of self-assembled transparent graphene films with UV/Ozone Treatment" Photonica 2017, 28.8 - 1.9.2017, Beograd, Srbija, ISBN 978-86-82441-46-5, str. 80.
19. Šolajić, J. Pešić and R. Gajić "Ab-initio calculations of electronic and vibrational properties of Sr and Yb-intercalated graphene", Photonica 2017, 28.8 - 1.9.2017, Beograd, Srbija, ISBN 978-86-82441-46-5, str. 88
20. J. Pešić, I. Popov, V. Damjanović, R. Gajić, "Enhancement of electron-phonon coupling in alkali-doped graphene and thin MgB_2 layers" 18th International Workshop on Computational Physics and Materials Science: Total Energy and Force Methods January 12-14, 2017 Miramare, Trieste, Italy
21. 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
22. 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
23. M. Spasenović, T.Tomašević-Ilić, J. Pešić, A. Matković, R. Gajić, "Transparent and Conductive Films With Liquid Phase Exfoliated Graphene", Euroscience Open Forum (ESOF), 2016, EuroScience Foundation (ESF), Velika Britanija, 23.07.2016, - 27.07.2016,

24. 8. J. Prinz, A. Matković, J. Pešić, B. Vasić, I. Bald, "DNA origami-gold nanoparticle-graphene double hybrid structures for surface-enhanced Raman scattering", DNANanotechnology, Jena, Nemačka, 19.05.2016 – 21.05.2016.
25. 9. J. Pešić, R. Gajić "Ab-initio study of optical properties of alkali metal-intercalated graphene and MoS₂", Photonica 2015, 978-86-7306-131-3, Beograd, Srbija, 24.08.2015 - 28.08.2015., str 193
26. 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
27. 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
28. 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
29. 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
30. 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,
31. 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.
32. 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.
33. 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 100

САОПШТЕЊЕ СА СКУПА НАЦИОНАЛНОГ ЗНАЧАЈА ШТАМПАНО У ИЗВОДУ (**M64**):

1. **Jelena Pešić and Andrijana Šolajić, First Principle study of Evolution of Vibrational Modes of FeSe Under Uniaxial Strain, Workshop In Strongly Correlated Electron Systems Belgrade, June 9 – 10, 2022, ISBN-978-86-82441-56-4, pp11

Република Србија
МИНИСТАРСТВО ПРОСВЕТЕ,
НАУКЕ И ТЕХНОЛОШКОГ РАЗВОЈА
Комисија за стицање научних звања

Број: 660-01-00001/120
31.10.2018. године
Београд

МИНИСТАРСТВО ПРОСВЕТЕ, НАУКЕ И ТЕХНОЛОШКОГ РАЗВОЈА			
ПРИМЛЈЕНО: 28.11.2018			
Рад.јед.	број	Арх.шифра	Прилог
ОФРОЈ	1853/1		

На основу члана 22. став 2. члана 70. став 4. Закона о научноистраживачкој делатности ("Службени гласник Републике Србије", број 110/05, 50/06 – исправка, 18/10 и 112/15), члана 3. ст. 1. и 3. и члана 40. Правилника о поступку, начину вредновања и квантитативном исказивању научноистраживачких резултата истраживача ("Службени гласник Републике Србије", број 24/16, 21/17 и 38/17) и захтева који је поднео

Инстџиџуџ за физику у Београду

Комисија за стицање научних звања на седници одржаној 31.10.2018. године, донела је

**ОДЛУКУ
О СТИЦАЊУ НАУЧНОГ ЗВАЊА**

Др Јелена Пешић

стиче научно звање

Научни сарадник

у области природно-математичких наука - физика

О Б Р А З Л О Ж Е Њ Е

Инстџиџуџ за физику у Београду

утврдио је предлог број 151/1 од 06.02.2018. године на седници Научног већа Института и поднео захтев Комисији за стицање научних звања број 196/1 од 13.02.2018. године за доношење одлуке о испуњености услова за стицање научног звања **Научни сарадник**.

Комисија за стицање научних звања је по претходно прибављеном позитивном мишљењу Матичног научног одбора за физику на седници одржаној 31.10.2018. године разматрала захтев и утврдила да именована испуњава услове из члана 70. став 4. Закона о научноистраживачкој делатности ("Службени гласник Републике Србије", број 110/05, 50/06 – исправка, 18/10 и 112/15), члана 3. ст. 1. и 3. и члана 40. Правилника о поступку, начину вредновања и квантитативном исказивању научноистраживачких резултата истраживача ("Службени гласник Републике Србије", број 24/16, 21/17 и 38/17) за стицање научног звања **Научни сарадник**, па је одлучила као у изреци ове одлуке.

Доношењем ове одлуке именована стиче сва права која јој на основу ње по закону припадају.

Одлуку доставити подносиоцу захтева, именованој и архиви Министарства просвете, науке и технолошког развоја у Београду.

ПРЕДСЕДНИК КОМИСИЈЕ

С. Станислава Стошић-Грујичић
Др Станислава Стошић-Грујичић,

научни саветник

МИНИСТАР

Младен Шарчевић
Младен Шарчевић



This author profile is generated by Scopus. Learn more

Pešić, Jelena

University of Belgrade, Belgrade, Serbia | 57202908500 | <https://orcid.org/0000-0002-8600-7187>

View more

254

Citations by 225 documents

62

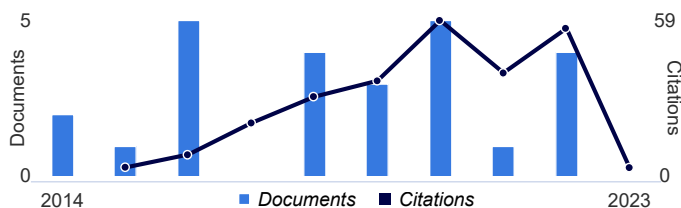
Co-authors

9

h-index View *h*-graph

- Set alert
- Edit profile
- Save to list
- Potential author matches
- Export to SciVal

Document & citation trends



Analyze author output Citation overview

Most contributed Topics 2017–2021

Ferromagnetic Material; Ferromagnetism; Magnets

5 documents

Intercalation Compounds; Superconductivity; Graphite

2 documents

Molybdenum Disulfide; Monolayer; Van Der Waals

1 document

View all Topics

Documents 62 Co-Authors 8 Topics 0 Awarded Grants ^{Beta}

Documents (25) Cited by (225) Preprints (8)

Export all Save all to list

Sort by Date...

> View list in search results format

Article • Open access

A universal substrate for the nanoscale investigation of two-dimensional materials

Tran, T.-H., Rodriguez, R.D., Cheshev, D., ...Matković, A., Sheremet, E.

Applied Surface Science, 2022, 604, 154585

Show abstract KoBSON View at Publisher Related documents

0

Citations

Article • Open access

Evolution of lattice, spin, and charge properties across the phase diagram of FeSe_{1-x}S_x

Lazarević, N., Baum, A., Milosavljević, A., ...Popović, Z.V., Hackl, R.

Physical Review B, 2022, 106(9), 094510

Show abstract   [View at Publisher](#)  [Related documents](#)

0

Citations

Article • [Open access](#)

Novel wide spectrum light absorber heterostructures based on hBN/In(Ga)Te

Solajic, A., Pesic, J.

Journal of Physics Condensed Matter, 2022, 34(34), 345301

Show abstract   [View at Publisher](#)  [Related documents](#)

0

Citations

Article

Structural and optical characterization of titanium–carbide and polymethyl methacrylate based nanocomposite

Pešić, J., Šolajić, A., Mitrić, J., ...Paunović, N., Romčević, N.

Optical and Quantum Electronics, 2022, 54(6), 354

Show abstract   [View at Publisher](#)  [Related documents](#)

1

Citations

Article • [Open access](#)

Probing charge density wave phases and the Mott transition in 1T-TaS₂ by inelastic light scattering

Djordjić Mijin, S., Baum, A., Bekaert, J., ...Hackl, R., Lazarević, N.

Physical Review B, 2021, 103(24), 245133

Show abstract   [View at Publisher](#)  [Related documents](#)

2

Citations

Article

Peculiar symmetry-protected electronic dispersions in two-dimensional materials

Damjanović, V., Lazić, N., Šolajić, A., ...Nikolić, B., Damnjanović, M.

Journal of Physics Condensed Matter, 2020, 32(48), 485501

Show abstract   [View at Publisher](#)  [Related documents](#)

1

Citations

Article • [Open access](#)

Short-Range Order in VI₃

Djordjić Mijin, S., Abeykoon, A.M.M., Šolajić, A., ...Popović, Z.V., Lazarević, N.

Inorganic Chemistry, 2020, 59(22), pp. 16265–16271

Show abstract   [View at Publisher](#)  [Related documents](#)

1

Citations

Article • [Open access](#)

Vacancies and spin–phonon coupling in CrSi_{0.8}Ge_{0.1}Te₃

Milosavljević, A., Šolajić, A., Višić, B., ...Popović, Z.V., Lazarević, N.

Journal of Raman Spectroscopy, 2020, 51(11), pp. 2153–2160

Show abstract   [View at Publisher](#)  [Related documents](#)

2

Citations

Article

Plasmon – Phonon interaction in ZnSnSb₂ + Mn semiconductors

Romcevic, M., Paunovic, N., Ralevic, U., ...Marenkin, S.F., Romcevic, N.

Infrared Physics and Technology, 2020, 108, 103345

Show abstract   [View at Publisher](#)  [Related documents](#)

0

Citations

Article

Optical and mechanical properties and electron–phonon interaction in graphene doped with metal atoms

Šolajić, A., Pešić, J., Gajić, R.

Optical and Quantum Electronics, 2020, 52(3), 182

Show abstract   [View at Publisher](#)  [Related documents](#)

0

Citations

Article • [Open access](#)

Lattice dynamics and phase transitions in Fe_{3-x}GeTe₂

Milosavljević, A., Šolajić, A., Djurdjić-Mijin, S., ...Lazarević, N., Popović, Z.V.

Physical Review B, 2019, 99(21), 214304

Show abstract   [View at Publisher](#)  [Related documents](#)

13

Citations

Article • [Open access](#)

Ab initio study of the electronic, vibrational, and mechanical properties of the magnesium diboride monolayer

Pešić, J., Popov, I., Šolajić, A., ...Belić, M., Gajić, R.

Condensed Matter, 2019, 4(2), pp. 1–10, 37

Show abstract   [View at Publisher](#)  [Related documents](#)

6

Citations

Article

Selected transport, vibrational, and mechanical properties of low-dimensional systems under strain

Celebonovic, V., Pesic, J., Gajic, R., Vasic, B., Matkovic, A.

Journal of Applied Physics, 2019, 125(15), 154301

Show abstract   [View at Publisher](#)  [Related documents](#)

5

Citations

Article • [Open access](#)

Evidence of spin–phonon coupling in CrSiTe₃

Milosavljević, A., Šolajić, A., Pešić, J., ...Lazarević, N., Popović, Z.V.

30

Citations

Article • *Open access*

Lattice dynamics and phase transition in CrI₃ single crystals

Djurđjić-Mijin, S., Šolajić, A., Pešić, J., ...Lazarević, N., Popović, Z.V.

Physical Review B, 2018, 98(10), 104307

44

Citations

Article

DFT study of optical properties of MoS₂ and WS₂ compared to spectroscopic results on liquid phase exfoliated nanoflakes

Pešić, J., Vujin, J., Tomašević-Ilić, T., Spasenović, M., Gajić, R.

Optical and Quantum Electronics, 2018, 50(7), 291

3

Citations

Article

Ab-initio calculations of electronic and vibrational properties of Sr and Yb intercalated graphene

Šolajić, A., Pešić, J., Gajić, R.

Optical and Quantum Electronics, 2018, 50(7), 276

2

Citations

Article

Hybrid Structures for Surface-Enhanced Raman Scattering: DNA Origami/Gold Nanoparticle Dimer/Graphene

Prinz, J., Matković, A., Pešić, J., Gajić, R., Bald, I.

Small, 2016, 12(39), pp. 5458–5467

34

Citations

Article

Ab-initio study of the optical properties of the Li-intercalated graphene and MoS₂

Pešić, J., Gajić, R.

Optical and Quantum Electronics, 2016, 48(7), 368

3

Citations

Article

Transparent and conductive films from liquid phase exfoliated graphene

Tomašević-Ilić, T., Pešić, J., Milošević, I., ...Spasenović, M., Gajić, R.

Optical and Quantum Electronics, 2016, 48(6), 319

Show abstract   View at Publisher  Related documents

19

Citations

Article • *Open access*

Enhanced structural stability of DNA origami nanostructures by graphene encapsulation

Matković, A., Vasić, B., Pešić, J., ...Milosavljević, A.R., Gajić, R.

New Journal of Physics, 2016, 18(2), 025016

Show abstract   View at Publisher  Related documents

18

Citations

Article

Enhanced sheet conductivity of Langmuir-Blodgett assembled graphene thin films by chemical doping

Matković, A., Milošević, I., Milićević, M., ...Belić, M.R., Gajić, R.

2D Materials, 2016, 3(1), 015002

Show abstract   View at Publisher  Related documents

21

Citations

Article

Density functional theory study of phonons in graphene doped with Li, Ca and Ba

Pešić, J., Damljanović, V., Gajić, R., Hingerl, K., Belić, M.

EPL, 2015, 112(6), 67006

Show abstract   View at Publisher  Related documents

13

Citations

Article • *Open access*

Strain-enhanced superconductivity in Li-doped graphene

Pešić, J., Gajić, R., Hingerl, K., Belić, M.

EPL, 2014, 108(6), 67005

Show abstract   View at Publisher  Related documents

36

Citations

Conference Paper

Advantages of GPU technology in DFT calculations of intercalated graphene

Pešić, J., Gajić, R.

Physica Scripta Topical Issues, 2014, T162, 014027

Show abstract   View at Publisher  Related documents

0

Citations

About Scopus

[What is Scopus](#)

[Content coverage](#)

[Scopus blog](#)

[Scopus API](#)

[Privacy matters](#)

Language

[日本語版を表示する](#)

[查看简体中文版本](#)

[查看繁體中文版本](#)

[Просмотр версии на русском языке](#)

Customer Service

[Help](#)

[Tutorials](#)

[Contact us](#)

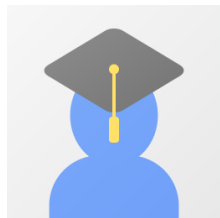
ELSEVIER

[Terms and conditions](#) ↗ [Privacy policy](#) ↗

Copyright © Elsevier B.V. ↗ . All rights reserved. Scopus® is a registered trademark of Elsevier B.V.

We use cookies to help provide and enhance our service and tailor content. By continuing, you agree to the use of cookies ↗.





Jelena Pesic

Institute of Physics Belgrade
, University of Belgrade

2d materials
density functional theory
superconductivity

	Све	Од 2018
Наводи	319	269
h-индекс	9	9
i10-индекс	9	9

3 чланка

14 чланака

није доступно

доступно

На основу услова
финансирања

НАСЛОВ	НАВЕЛО	ГОДИНА
A universal substrate for the nanoscale investigation of two-dimensional materials TH Tran, RD Rodriguez, D Cheshev, NE Villa, MA Aslam, J Pešić, ... Applied Surface Science 604, 154585		2022
Evolution of lattice, spin, and charge properties across the phase diagram of $\text{FeSe}_{1-x}\text{S}_x$ N Lazarević, A Baum, A Milosavljević, L Peis, R Stumberger, J Bekaert, ... Physical Review B 106 (9), 094510		2022
Spin-phonon interaction and short range order in $\text{Mn}_3\text{Si}_2\text{Te}_6$ SD Mijin, A Šolajić, J Pešić, Y Liu, C Petrovic, M Bockstedte, A Bonanni, ... arXiv preprint arXiv:2209.02664		2022
Novel wide spectrum light absorber heterostructures based on hBN/In (Ga) Te A Šolajić, J Pešić Journal of Physics: Condensed Matter 34 (34), 345301		2022
Structural and optical characterization of titanium–carbide and polymethyl methacrylate based nanocomposite J Pešić, A Šolajić, J Mitrić, M Gilić, I Pešić, N Paunović, N Romčević Optical and Quantum Electronics 54 (6), 354	1	2022
Probing charge density wave phases and the Mott transition in $1T - \text{TaS}_2$ by inelastic light scattering SD Mijin, A Baum, J Bekaert, A Šolajić, J Pešić, Y Liu, G He, MV Milošević, ... Physical Review B 103 (24), 245133	6	2021
Vacancies and spin–phonon coupling in $\text{CrSi}_{0.8}\text{Ge}_{0.1}\text{Te}_3$ A Milosavljević, A Šolajić, B Višić, M Opačić, J Pešić, Y Liu, C Petrovic, ... Journal of Raman Spectroscopy 51 (11), 2153-2160	3	2020
Short-Range Order in VI_3 S Djurdjić Mijin, AMM Abeykoon, A Solajic, A Milosavljević, J Pesic, Y Liu, ... Inorganic Chemistry 59 (22), 16265-16271	3	2020

НАСЛОВ	НАВЕЛО	ГОДИНА
<p>Peculiar symmetry-protected electronic dispersions in two-dimensional materials</p> <p>V Damljanović, N Lazić, A Šolajić, J Pešić, B Nikolić, M Damljanović Journal of Physics: Condensed Matter 32 (48), 485501</p>	3	2020
<p>Plasmon–Phonon interaction in ZnSnSb₂+ Mn semiconductors</p> <p>M Romcevic, N Paunovic, U Ralevic, J Pesic, J Mitric, J Trajic, L Kilanski, ... Infrared Physics & Technology 108, 103345</p>		2020
<p>Optical and mechanical properties and electron–phonon interaction in graphene doped with metal atoms</p> <p>A Šolajić, J Pešić, R Gajić Optical and Quantum Electronics 52 (182), 1-10</p>		2020
<p>Lattice dynamics and phase transitions in Fe_{3-x}GeTe₂</p> <p>A Milosavljević, A Šolajić, S Djurdjic-Mijin, J Pešić, B Višić, Y Liu, ... Physical Review B 99 (21), 214304</p>	18	2019
<p>Selected transport, vibrational, and mechanical properties of low-dimensional systems under strain</p> <p>V Čelebonović, J Pešić, R Gajić, B Vasić, A Matković Journal of Applied Physics 125 (15), 154301</p>	8	2019
<p>Ab initio study of the electronic, vibrational, and mechanical properties of the magnesium diboride monolayer</p> <p>J Pešić, I Popov, A Šolajić, V Damljanović, K Hingerl, M Belić, R Gajić Condensed Matter 4 (2), 37</p>	7	2019
<p>Evidence of spin-phonon coupling in CrSiTe₃</p> <p>A Milosavljević, A Šolajić, J Pešić, Y Liu, C Petrovic, N Lazarević, ... Physical Review B 98 (10), 104306</p>	35	2018
<p>Lattice dynamics and phase transition in CrI₃ single crystals</p> <p>S Djurdjic-Mijin, A Šolajić, J Pešić, M Šćepanović, Y Liu, A Baum, ... Physical Review B 98 (10), 104307</p>	53	2018
<p>DFT study of optical properties of MoS₂ and WS₂ compared to spectroscopic results on liquid phase exfoliated nanoflakes</p> <p>J Pešić, J Vujin, T Tomašević-Ilić, M Spasenović, R Gajić Optical and Quantum Electronics 50, 1-9</p>	4	2018
<p>Ab-initio calculations of electronic and vibrational properties of Sr and Yb intercalated graphene</p> <p>A Šolajić, J Pešić, R Gajić Optical and Quantum Electronics 50, 1-10</p>	1	2018
<p>Investigation of superconductivity in graphene and related materials using AB-initio methods</p> <p>JR Pešić Универзитет у Београду</p>	1	2017

НАСЛОВ

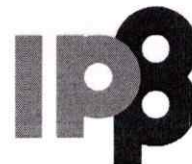
НАВЕЛО ГОДИНА

Ab-initio study of optical properties of MoS₂ and WS₂ compared to spectroscopic results of liquid phase exfoliated nanoflakes

2017

J Pešić, J Vujin, T Tomašević-Ilić, M Spasenović, R Gajić
Book of abstracts, 94

ПРИЛО



Република Србија
Министарство просвете, науке и технолошког развоја

Број 0801 - 125/1
Датум 31. 01. 2022

**Извештај о реализацији билатералног пројекта за период
од 1. јул 2018. до 31. децембар 2021. године**

Билатерални програм са: <i>Навести државу</i>	Аустрија
Пројектни циклус:	Програм билатералне научне и технолошке сарадње између Србије и Аустрије за пројектни циклус 2018-2019. године
Назив пројекта: <i>На српском језику</i>	Моделовање и мерење фазних прелаза и оптичких особина код перовскита
Евиденциони бр. Пројекта:	451-03-02141/2017-09/31
Руководилац српског пројектног тима:	Јелена Пешић
Научноистраживачка организација у РС:	Институ за Физику Београд, Универзитет у Београду

Место, датум:

Београд, 31.01.2022.

Jelena Pešić

Руководилац пројекта



Influence of atmospheric zinc deposition on different genotypes of the moss <i>Atrichum undulatum</i>	Marko SABOVLJEVIĆ	University of Belgrade;	Faculty of Biology;	Ingeborg LANG	Universität Wien;	Department für Botanik und Biodiversitätsforschung; Fakultät für Lebenswissenschaften;
Seismic evaluation of existing buildings in Serbia and Austria – assessment, retrofitting and strengthening	Ivan IGNJATOVIĆ	University of Belgrade;	Faculty of Civil Engineering;	Suikai LU	Technische Universität Wien;	Fakultät für Bauingenieurwesen;
TESTING THE HYGIENE HYPOTHESIS: TRICHINELLA SPIRALIS-SECRETED PROTEINS IN TREATMENT OF AIRWAY INFLAMMATION	Alisa GRUDEN MOVSESIJAN	Institute for the Application of Nuclear Energy, University of Belgrade;	Immunology and immunoparasitology	Irma SCHABUSSOVA	Medizinische Universität Wien;	Institut für Spezifische Prophylaxe und Tropenmedizin;
Controlled induction of hyperthermia by nanoparticles in magnetic resonance imaging (MRI)	Marin TADIĆ	Institute of Nuclear Sciences Vinca;	Laboratory for Atomic Physics; Laboratory for Theoretical and Condensed Matter Physics;	Jelena ZINNANTI	Österreichische Akademie der Wissenschaften; Vienna Biocenter Core Facilities GmbH;	Institute of Molecular Biotechnology; Preclinical Imaging;
Nanoscale electrical properties of van der Waals heterostructures composed of two-dimensional materials and organic semiconductors	Borislav VASIĆ	University of Belgrade;	Institute of Physics Belgrade, University of Belgrade;	Markus KRATZER	Montanuniversität Leoben;	Institut für Physik;
The potential use of biomass for sequestration of organic pollutants in soil / sediment	Snežana MALETIĆ	University of Novi Sad;	Department of Chemistry, Biochemistry and Environmental Protection; Faculty of Sciences;	Milica VELIMIROVIC	Universität Wien;	Department für Umweltgeowissenschaften;
Disentangling relationships in two vegetation-forming plant groups using genetic and morphological data	Dmitar LAKUŠIĆ	University of Belgrade;	Faculty of Biology;	Bozo FRAJMAN	Universität Innsbruck;	Institut für Botanik;
Cardiac remodelling down the calmodulin kinase II cascade	Milan IVANOV	University of Belgrade;	Institute for Medical Research;	Senka HOLZER	Medizinische Universität Graz;	Abteilung für Kardiologie;
Millipedes as Chemists: A novel Source for Biologically Active Natural Compounds	Slobodan MAKAROV	University of Belgrade;	Faculty of Biology;	Günther RASPOTNIG	Universität Graz;	Institut für Zoologie;
Causality in Quantum Mechanics and Quantum Gravity	Marko VOJINOVIĆ	University of Belgrade;	Institute of Physics Belgrade, University of Belgrade;	Caslav BRUKNER	Österreichische Akademie der Wissenschaften;	Institut für Quantenoptik und Quanteninformation;

Structure investigation and physical properties of alkali metal rare-earth silicates and transition metal complexes with Schiff base ligands	Marko RODIĆ	Institute of Nuclear Sciences Vinca; University of Belgrade; University of Novi Sad;	Chemical Crystallography Group; Faculty of Mining and Geology; Faculty of Sciences;	Biljana KRUEGER	Universität Innsbruck;	Fakultät für Geo- und Atmosphärenwissenschaften;
ANACRES - Analysis and Acoustics Research	Nenad TEOFANOV	University of Belgrade; University of Novi Sad;	Faculty of Forestry; Faculty of Sciences; Faculty of Technical Sciences;	Peter BALAZS	Österreichische Akademie der Wissenschaften; Universität Wien;	Fakultät für Mathematik; Institut für Schallforschung / Mathematik und (Akustische)
Stakeholder Engagement in Rural Tourism	Slavica TOMIĆ	University of Novi Sad;	Faculty of Economics Subotica;	Pernille ESKEROD	Webster University;	Business & Management Department;
Development and standardization of diagnostic tests for detection of Lumpy skin disease, testing of the duration of maternal immunity and determination of the right time for vaccination of young animals	Tamaš PETROVIĆ	University of Novi Sad;	Scientific Veterinary Institute "Novi Sad";	Angelika LOITSCH	AGES - Agentur für Gesundheit und Ernährungssicherheit;	Institut für veterinärmedizinische Untersuchungen;
Modelling and Measuring Phase transitions and Optical Properties for Perovskites	Jelena PESIC	University of Belgrade;	Faculty of Physics;	Kurt LOITSCH	Johannes Kepler Universität Linz;	Zentrum für Oberflächen- und Nanoanalytik;
Functional analytic methods for models of wave propagation in viscoelastic media	Ljubica OPARNICA	University of Novi Sad;	Faculty of Education in Sombor; Faculty of Mathematics;	Guenther HOERMANN	Universität Wien;	Fakultät für Mathematik;
Production, improvement, characterization and usage of fungal enzyme complexes in obtaining new cereal dietary fibers	Biljana DOJNOV	University of Belgrade;	Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy;	Bernhard SEIBOTH	Technische Universität Wien;	Fakultät für Technische Chemie;
Harmonization of the microbiological methods for the assessment of the Danube River water quality	Margareta KRAČUN-KOLAREVIĆ	University of Belgrade;	Faculty of Biology; Institute for Biological Research "Sinisa Stankovic";	Alexander KIRSCHNER	Karl Landsteiner Privatuniversität für Gesundheitswissenschaften GmbH; Medizinische Universität Wien;	Microbiological Diagnostics for Water and Health; Zentrum für Pathophysiologie, Infektiologie und Immunologie;
Scaffolds with controlled 3-D architecture designed by photopolymerization	Magdalena STEVANOVIĆ	Serbian Academy of Sciences And Arts;	Institute of Technical Sciences;	Jürgen STAMPFL	Technische Universität Wien;	Fakultät für Maschinenwesen und Betriebswissenschaften;
Evaluation of the potential of a new probiotic concept for the management of obesity and its associated comorbidities	Brižita ĐORĐEVIĆ	University of Belgrade;	Faculty of Pharmacy; School of Medicine;	Alexander HASLBERGER	Universität Wien;	Department of Nutritional Sciences;

Improving capacity to modify protein-oil crops seed composition	Marina ĆERAN	Inst. Field and Vegetable Crops;	Soybean;	Johann VOLLMANN	Universität für Bodenkultur Wien;	Department für Nutzpflanzenwissenschaften;
A link between climate change and canine babesiosis	Milica KOVAČEVIĆ FILIPOVIĆ	University of Belgrade; Veterinärmedizinische Universität Wien;	Department für Kleintiere und Pferde; Faculty of Veterinary Medicine;	Ernst LEIDINGER	Veterinärmedizinische Universität Wien;	Institut für Medizinische Chemie;
Domestic animals as models in biomedical research	Danijela KIROVSKI	University of Belgrade;	Faculty of Veterinary Medicine;	Vladimir BUBALO	Medizinische Universität Graz;	Hals-, Nasen-, Ohren-Universitätsklinik; Universitätsklinik für Chirurgie;
Lead free Aurivillius-based materials: close-line between Raman spectroscopy and ferro/multiferroic properties	Jelena BOBIĆ	University of Belgrade;	Institute for Multidisciplinary Research;	Marco DELUCA	Materials Center Leoben Forschung GmbH;	Materials for Microelectronics;
Trichoderma spp. – a causative agent of green mould disease on cultivated mushrooms; identification and disease control with antagonistic microorganisms	Ivana POTOČNIK	University of Belgrade;	Institute of Pesticides and Environmental Protection;	Irina DRUZHININA	Technische Universität Wien;	Institut für Verfahrenstechnik, Umwelttechnik & techn. Biowissenschaften;
Novel N-heteroaromatic 1,3-(chalcogenazol-2-yl)hydrazones and their d-metal complexes as potential multi-targeting anti-cancer stem cell agents	Tamara TODOROVIĆ	University of Belgrade;	Faculty of Chemistry;	Iralda SKVORTSOVA	Medizinische Universität Innsbruck;	Univ.Klinik f. Strahlentherapie und Radioonkologie;
INVOLVEMENT OF GABAA RECEPTORS IN MODULATION OF NEUROPATHIC PAIN IN ANIMAL MODELS	Miroslav SAVIĆ	University of Belgrade;	Faculty of Pharmacy;	Petra SCHOLZE	Medizinische Universität Wien;	Zentrum für Hirnforschung;

To
Dr. Jelena Pešić
Institute of Physics Belgrade, University of
Belgrade
Pregrevica 118
Zemun, Belgrade, 11080
Serbia

by e-mail only: yelena@ipb.ac.rs

Vienna, November 22, 2019
AZ/jk

JESH Application [Joint Excellence in Science and Humanities]

Dear Dr Pešić,

Thank you very much for your interest in the JESH programme and for sending a most intriguing proposal. I am very pleased to be able to inform you that you have been awarded a JESH grant by the Austrian Academy of Sciences for a period of **4 months**, subject to compliance with the requirements of the JESH programme.

I congratulate you most warmly and wish you a successful research stay in Austria.

Sincerely yours,





УГОВОР О БЕСПОВРАТНОМ ФИНАНСИРАЊУ

пројекта

„Употреба наноматеријала за потребе ојачавања дрвета као конструктивног материјала“

број пројекта 5574

у оквиру програма Доказ концепта

Фонда за иновациону делатност

Овај уговор о бесповратном финансирању 5574 (у даљем тексту: „Уговор“) закључен је између следећих уговорних страна:

I ФОНД ЗА ИНОВАЦИОНУ ДЕЛАТНОСТ, правно лице установљено у складу са Законом о иновационој делатности и регистровано у Агенцији за привредне регистре Републике Србије, под матичним бројем: 20154691, ПИБ: 104403200, са седиштем у Београду, Република Србија, у улици Немањина 22-26, чији је заступник директор др Иван Ракоњац (у даљем тексту: „Фонд“), са једне стране

и

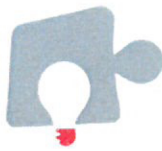
II Институт за физику, правно лице регистровано у Привредном суду у Београду, под матичним бројем: 07018029, ПИБ: 100105980, са седиштем у Београду-Земуну, Република Србија, у улици Прегревица 118, чији је заступник директор, др Александар Богојевић (у даљем тексту: „Корисник финансирања“), са друге стране, а како следи:

Члан 1

Уговорне стране сагласно констатују да:

1) Фонд учествује у спровођењу Пројекта подршке конкурентности и запошљавању (у даљем тексту: „Пројекат“), чији је циљ подршка имплементацији програма Фонда за јачање иновативности привреде, поспешивање трансфера технологија и унапређење учинака истраживачког сектора у односу на привреду и друштво уопште. У оквиру Пројекта се реализује сервисни програм трансфера технологије (у даљем тексту: „Програм трансфера технологије“), који спроводи Фонд;

2) Фонд у оквиру Програма трансфера технологије и као једну од његових сервисних линија имплементира програм „Доказ концепта“ (на енглеском језику: „Proof-of-Concept“) чији су циљеви да, додељивањем бесповратних финансијских средстава и омогућавањем услуга пословног саветовања од стране стручних лица, подржи истраживачке и развојне активности потенцијалних корисника, у фази када је неопходна провера комерцијалне и друштвене вредности досадашњих резултата њихових активности, ојача процес стварања комерцијално спремних пројеката и повећа значај научног истраживања и развоја путем креирања нових друштвено и/или економски битних производа (у даљем тексту: „Програм“);



Proof-of-Concept Application Form

Test the market potential of your idea and solution

By completing and submitting this Application form, I am applying for the support/services under the Proof-of-Concept Program that is implemented by the Technology Transfer Facility within the Innovation Fund (hereinafter: "PoC Program"), for my project entitled: **Nano-reinforced wood for structural elements** (hereinafter: "Project"), Project ID number **5574** disclosed in the following Application form.

PoC Program tests, develops and advances your scientific idea coming from your research and commercialize it into a market-worthy product for the appropriate market niche.

IMPORTANT:

- The PoC Application form is a written description of your Project. By entering correct and complete data in this form you help the Innovation Fund (hereinafter the "IF") to properly evaluate your Project.
- Information exchange between you and the Innovation Fund about your Project is confidential. To avoid any inadvertent public disclosure of your Project please use an appropriate Confidential Disclosure Agreement to protect discussions with others.
- A completed PoC Application form should be submitted in electronic form through the official PoC Portal that can be accessed through the [Innovation Fund webpage](#) or directly via [PoC Portal](#). If you have any questions regarding the completion of the Application form please contact the Innovation Fund via email at PoC@inovacionifond.rs.



PROJECT INFORMATION

1. GENERAL INFORMATION

Title of the Project (English): Nano-reinforced wood for structural elements
Title of the Project (Serbian): Upotreba nanomaterijala za potrebe ojačavanja drveta kao konstruktivnog elementa
Project ID: 5574
Name of the project leader/principal researcher: Ivana R. Milošević
[REDACTED]
Project leader's/principal researcher's email: novovic@ipb.ac.rs
[REDACTED]
Employer R&D organization: Institute of physics Belgrade
Industry area: Chemical engineering

All correspondence with, and questions for, the Project team will be addressed to the project leader/principal researcher.

2. OTHER TEAM MEMBERS

List the research team members that will actively contribute throughout this project. Team members from other (R&D) organizations could be included in the list. Make sure to include only those individuals whose input is critical for the project success. Individuals doing routine measurements and testing and not actively contributing to the project should not be included. External contractors that will be paid from budget category II. Experimental PoC should not be named as team members.

Team member's name: Jelena Pešić
[REDACTED]
Team member's email: yelena@ipb.ac.rs

ЗАПИСНИК

са V седнице Изборног и Наставно-научног већа Физичког факултета одржане
у среду 23. фебруара 2022. године

Седници присуствује 46 чланова Изборног и Наставно-научног већа, од чега 20 у сали и 16
online.

Оправдано одсутни: проф. др Маја Бурић
проф. др Милош Вићић
проф. др Милорад Кураица
доц. др Весна Ковачевић
доц. др Сузана Путниковић

Неоправдано одсутни: проф. др Зоран Борјан
проф. др Едиб Добарџић
проф. др Предраг Миленовић
доц. др Владимир Миљковић

Декан Факултета отворио је седницу у 11:05 часова и предложио следећи

Дневни ред

1. Усвајање Записника са IV седнице Изборног и Наставно-научног већа Физичког факултета.

Изборно веће

2. Усвајање Извештаја Комисије за избор др ДРАГАНЕ ЦЕРОВИЋ у звање вишег научног сарадника.
3. Разматрање предлога Катедре за физику кондензованог стања о покретању поступка за избор
 - a) једног наставника у звање ванредног професора за ужу научну област Физика кондензованог стања
4. Избор у звање истраживач-приправник и то:
 - a) Душана Ђорђевића
 - b) Стефана Ђорђевића
 - c) Иване Стојиљковић
 - d) Ђорђе Богдановић

Наставно-научно веће

5. Усвајање Извештаја Комисије за оцену испуњености услова и оправданост предложене теме за израду докторске дисертације и одређивање ментора за:
 - a) АНДРИЈАНУ ШОЛАЛИЋ (2017/8005), мастер инжењера електротехнике и рачунарства, која је пријавила докторску дисертацију под називом: "ИСПИТИВАЊЕ УТИЦАЈА НАПРЕЗАЊА НА ОСОБИНЕ ХЕТЕРОСТРУКТУРА ДВОДИМЕНЗИОНАЛНИХ МОНОХАЛКОГЕНИДА IIIa ГРУПЕ AB-INITIO МЕТОДАМА" (Investigation of strain effects on properties of heterostructures based on 2D groDup IIIa monochalcogenides using ab-initio methods)
6. Усвајање извештаја Комисије за преглед и оцену докторске дисертације и одређивање Комисије за одбрану дисертације за:
 - a) ДЕЈАНА ДОЈИЋА (8004/2017), мастер физичара, који је предао докторску под називом: „ДИНАМИКА И ЕКСПАНЗИЈА ЛАСЕРСКИ ПРОИЗВЕДЕНЕ ПЛАЗМЕ“, урађену под менторством проф. др Срђана Буквића.
 - b) ИВАНУ ЂУРИШИЋ (8019/2016), дипломираног физичара, која је предала докторску дисертацију под називом: „ЕЛЕКТРОНСКИ ТРАНСПОРТ И РЕКТИФИКАЦИЈА ТРАНСВЕРЗАЛНЕ ЕЛЕКТРИЧНЕ СТРУЈЕ КРОЗ ДНК НУКЛЕОТИДЕ У НАНОПРОЦЕПУ“, урађену под менторством др Милоша Дражића, научног сарадника Института за мултидисциплинарна истраживања.
7. Формирање Комисије за припрему предлога измена и допуна Статута Физичког факултета.

8. Питања наставе, науке и финансија.
9. Захтеви за одобрење одсуства.
10. Усвајање извештаја са службених путовања.
11. Дописи и молбе упућене Наставно-научном већу.
12. Обавештења. Текућа питања. Питања и предлози.

Пошто је усвојен предложени Дневни ред, прешло се на

1. тачку

Усвојен је Записник са IV седнице Изборног и Наставно-научног већа Физичког факултета.

Изборно веће

2. тачка

Након гласања у коме су учествовали редовни и ванредни професори Факултета, као и научни саветници и виши научни сарадници, једногласно, са 27 гласова ЗА (од укупно 33 колико чини изборно тело), усвојен је Извештај Комисије и утврђен предлог за избор др ДРАГАНЕ ЦЕРОВИЋ у звање вишег научног сарадника.

3. тачка

На предлог Катедре за физику кондензованог стања покренут је поступак за избор једног наставника у звању ванредног професора за ужу научну област Физика кондензованог стања.

*Комисија: др Јаблан Дојчиловић, редовни професор ФФ у пензији
 др Ђорђе Спасојевић, редовни професор ФФ
 др Наташа Јовић – Орсини, виши научни сарадник, ИНН Винча*

4. тачка

У звање истраживач-приправник на Физичком факултету изабрани су следећи студенти докторских студија:

- a) Душан Ђорђевић
- b) Стефан Ђорђевић
- c) Ивана Стојиљковић
- d) Ђорђе Богдановић

Наставно-научно веће

5. тачка

Усвојен је Извештај Комисије за оцену испуњености услова и оправданост предложене теме за израду докторске дисертације и одређен ментор за:

- а) АНДРИЈАНУ ШОЛАЛИЋ (2017/8005), мастер инжењера електротехнике и рачунарства, која је пријавила докторску дисертацију под називом: "ИСПИТИВАЊЕ УТИЦАЈА НАПРЕЗАЊА НА ОСОБИНЕ ХЕТЕРОСТРУКТУРА ДВОДИМЕНЗИОНАЛНИХ МОНОХАЛКОГЕНИДА IIIa ГРУПЕ АВ-INITIO МЕТОДАМА" (Investigation of strain effects on properties of heterostructures based on 2D groDup IIIa monochalcogenides using ab-initio methods)

Ментор: др Јелена Пешић, научни сарадник ИФ

6. тачка

Усвојен је Извештај Комисије за преглед и оцену докторске дисертације и одређена Комисије за одбрану дисертације за:

- а) ДЕЈАНА ДОЈИЋА (8004/2017), мастер физичара, који је предао докторску под називом: „ДИНАМИКА И ЕКСПАНЗИЈА ЛАСЕРСКИ ПРОИЗВЕДЕНЕ ПЛАЗМЕ“, урађену под менторством проф. др Срђана Буквића.

Комисија: др Ђорђе Спасојевић, редовни професор ФФ

др Милош Скочић, доцент ФФ

др Мирослав Кузмановић, редовни професор, Фак. за физичку хемију

- б) ИВАНУ ЂУРИШИЋ (8019/2016), дипломираног физичара, која је предала докторску дисертацију под називом: „ЕЛЕКТРОНСКИ ТРАНСПОРТ И РЕКТИФИКАЦИЈА ТРАНСВЕРЗАЛНЕ ЕЛЕКТРИЧНЕ СТРУЈЕ КРОЗ ДНК НУКЛЕОТИДЕ У НАНОПРОЦЕПУ“, урађену под менторством др Милоша Дражића, научног сарадника Института за мултидисциплинарна истраживања.

Комисија: др Горан Попарић, редовни професор ФФ

др Божидар Николић, ванредни професор ФФ

др Жељко Шљиванчанин, научни саветник ИНН Винча

7. тачка

На предлог продекана за наставу доц. др Зорице Поповић, именована је Комисија за припрему предлога измена и допуна Статута Физичког факултета и то:

Комисија: проф. др Ивана Тошић

доц. др Зорица Поповић

Лелица Вуковић-Радош

Лука Булаја, студент продекан

Златан Васовић, председник студентског парламента

8. тачка

Питања наставе

Након кратке дискусије о резултатима анкете, Наставно-научно веће је донело одлуку да се намање наредне две недеље настава одржава по моделу из јесењег семестра, предавања и рачунске вежбе online, експерименталне вежбе уживо у лабораторијама у мањим групама.

Продекан за наставу доц. др Зорица Поповић позвала је присутне да се изјасне о допису који је упутила деканка Природно-математичког факултета у Новом Саду у вези са усаглашавањем ставова факултета природних наука по питању државне матуре. Наставно-научно веће је подржало ставове ПМФ-а и Универзитета у Новом Саду да државна матура у периоду од најмање три године не може заменити пријемни испит на факултет, већ треба анализирати успешност ученика на студијама и пријемном испиту у односу на успех на државној матури. Након овог периода и озбиљне анализе добијених података биће могуће поново размотрити примену државне матуре за упис студија.

Питања науке

Продекан за науку проф. др Стеван Стојадиновић обавестио је чланове Већа да је Министарство расписало конкурс за пријем младих истраживача - студената докторских студија у акредитоване НИО. Конкурс је отворен до 25. маја 2022. године, те је продекан позвао заинтересоване студенте докторских студија да покрену поступак за избор у звање истраживач-приправник.

9. тачка

Наставно-научно веће је прихватило извештај са службеног путовања проф. др Владимира Милосављевића који је у периоду од 22. јануара до 21. фебруара 2022. године боравио на Универзитету у Даблину (Ирска).

Седница је завршена у 11:25 часова.

Београд, 24.2.2022.

ДЕКАН ФИЗИЧКОГ ФАКУЛТЕТА
Проф. др Иван Белча, с.р.

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.

Submitted by
Max Hofinger

Submitted at
**Institute of Semicon-
ductor and Solid State
Physics**

Supervisor and
First Examiner
**Univ. Prof. Dr. Alberta
Bonanni**

Co-Supervisor
**Ass. Prof. Dr. Jelena
Pestic**

January 2023

VASP - Simulations Introduction: Report



in the Master's Program
Nanoscience & Technology

7-11th October 2019
Belgrade, Serbia



<http://www.sfkm.ac.rs/>

The 20th Symposium on Condensed Matter Physics

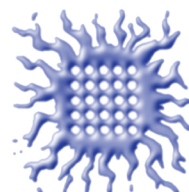
BOOK OF ABSTRACTS



University of Belgrade,
Faculty of Physics



Institute of Physics Belgrade



Vinca Institute
of Nuclear Sciences



Serbian Academy
of Sciences and Arts



Ministry of Education, Science and
Technological Development,
Republic of Serbia

Conference Chair

Cedomir Petrovic, *Brookhaven National Laboratory, USA*

Željko Šljivančanin, *Vinča Institute of Nuclear Sciences Serbia*

Program Committee

Ivan Božović, *Brookhaven National Laboratory, USA*

Vladimir Dobrosavljević, *Florida State University, USA*

Milan Damnjanović, *Faculty of Physics, University of Belgrade, Serbia*

Vladimir Djoković, *Vinča Institute, University of Belgrade, Serbia*

Gyula Eres, *Oak Ridge National Laboratory, USA*

Laszló Forró, *Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, Switzerland*

Radoš Gajić, *Institute of Physics Belgrade, University of Belgrade, Serbia*

Igor Herbut, *Simon Fraser University, Canada*

Zoran Ikonić, *University of Leeds, UK*

Ivanka Milošević, *Faculty of Physics, University of Belgrade, Serbia*

Branislav Nikolić, *University of Delaware, USA*

Cedomir Petrovic, *Brookhaven National Laboratory, USA*

Dragana Popović, *National High Magnetic Field Laboratory USA*

Zoran S. Popović, *Vinča Institute, University of Belgrade, Serbia*

Zoran V. Popović, *Institute of Physics, University of Belgrade, Serbia*

Zoran Radović, *Faculty of Physics, University of Belgrade, Serbia*

Miljko Satarić, *Faculty of Technical Sciences, University of Novi Sad, Serbia*

Vojislav Stamenković, *Argonne National Laboratory, USA*

Željko Šljivančanin, *Vinča Institute, University of Belgrade, Serbia*

Bosiljka Tadić, *Jožef Štefan Institute, Slovenia*

Milan Tadić, *School of Electrical Engineering, University of Belgrade, Serbia*

Darko Tanasković, *Institute of Physics, University of Belgrade, Serbia*

Organizing Committee

Jelena Pešić, *Institute of Physics Belgrade*

Andrijana Šolajić, *Institute of Physics Belgrade*

Petar Mali, *Faculty of Sciences, University of Novi Sad*

Jelena Pajović, *Faculty of Physics, University of Belgrade, Serbia*

Srđan Stavrić, *Vinča Institute of Nuclear Sciences*

Svetislav Mijatović, *Faculty of Physics, University of Belgrade, Serbia*

Božidar Nikolić, *Faculty of Physics, University of Belgrade, Serbia – chair*

Organized by

Institute of Physics Belgrade

Faculty of Physics, University of Belgrade

Vinča Institute of Nuclear Sciences

Serbian Academy of Sciences and Arts



9-10 June 2022, Institute of Physics Belgrade

<http://strainedfesc.ipb.ac.rs/workshop-in-strongly-correlated-electron-systems/>

WORKSHOP IN STRONGLY CORRELATED ELECTRON SYSTEMS

Special focus of the conference will be devoted to Iron-chalcogenide superconductors and research performed during StrainedFeSC project.

"Workshop in strongly correlated electron systems" will be held in honor of Academician Zoran V. Popovic.

This workshop is supported by the Science Fund of the Republic of Serbia under the grant number 6062656 at Institute of Physics Belgrade Serbia.



Organization Committee

Dr. Nenad Lazarević, *Institute of Physics Belgrade, University of Belgrade*

Dr. Jelena Pešić, *Institute of Physics Belgrade, University of Belgrade*

Dr. Borislav Vasić, *Institute of Physics Belgrade, University of Belgrade*

Dr. Ana Milosavljević, *Institute of Physics Belgrade, University of Belgrade*

Dr. Sanja Đurđić Mijin, *Institute of Physics Belgrade, University of Belgrade*

MSc Andrijana Šolajić, *Institute of Physics Belgrade, University of Belgrade*

SUPPORTED BY



Фонд за науку
Републике Србије



**Center for Solid
State Physics &
New Materials**



Symposium on
Condensed
Matter Physics

[Home](#) [Committies](#) [Invited Speakers](#) [Book of Abstracts](#)

[Local Information](#) [Contact](#)

COMMITTIES

Conference Chair

- Vladimir Dobrosavljević, Florida State University,
- Zorica Konstantinović, Institut za fiziku, Beograd,
- Željko Šljivančanin, Institut "Vinča", Beograd

Organizing Committee

- Jelena Pešić (IF) - chair
- Andrijana Šolajić (IF)
- Petar Mali (PMF Novi Sad)
- Jelena Pajović (FF)
- Svetislav Mijatović (FF)
- Ivana Milošević (IF)
- Tijana Tomašević-Ilić (IF)
- Jelena Mitrić (IF)
- Bojana Višić (IF)

Program Committee

- Ivan Božović, Brookhaven National Laboratory, USA
- Vladimir Dobrosavljević, Florida State University, USA
- Milan Damnjanović, Faculty of Physics, University of Belgrade, Serbia
- Vladimir Djoković, Vinča Institute, University of Belgrade, Serbia
- Gyula Eres, Oak Ridge National Laboratory, USA
- Laszló Forró, University of *Notre Dame*, USA

- Radoš Gajić, Institute of Physics, University of Belgrade, Serbia
- Igor Herbut, Simon Fraser University, Canada
- Zoran Ikonić, University of Leeds, UK
- Nenad Lazarević, Institute of Physics, University of Belgrade, Serbia
- Ivanka Milošević, Faculty of Physics, University of Belgrade, Serbia
- Milorad Milošević, University of Antwerp Belgium
- Milica Milovanović, Institute of Physics, University of Belgrade, Serbia
- Stevan Nadj-Perge, CALTECH, USA
- Branislav Nikolić, University of Delaware, USA
- Cedomir Petrovic, Brookhaven National Laboratory, USA
- Dragana Popović, National High Magnetic Field Laboratory USA
- Zoran V. Popović, Institute of Physics, University of Belgrade, Serbia
- Zoran Radović, Faculty of Physics, University of Belgrade, Serbia
- Miljko Satarić, Faculty of Technical Sciences, University of Novi Sad, Serbia
- Marko Spasenović, Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, Belgrade, Serbia
- Djordje Spasojević, Faculty of Physics, University of Belgrade, Serbia
- Željko Šljivančanin, Vinča Institute, University of Belgrade, Serbia
- Bosiljka Tadić, Jožef Štefan Institute, Slovenia
- Milan Tadić, School of Electrical Engineering, University of Belgrade, Serbia
- Darko Tanasković, Institute of Physics, University of Belgrade, Serbia
- Jasmina Tekić, Vinča Institute, Belgrade, Serbia
- Nenad Vukmirović, Institute of Physics, University of Belgrade, Serbia

Symposium on Condensed Matter Physics, © 2023

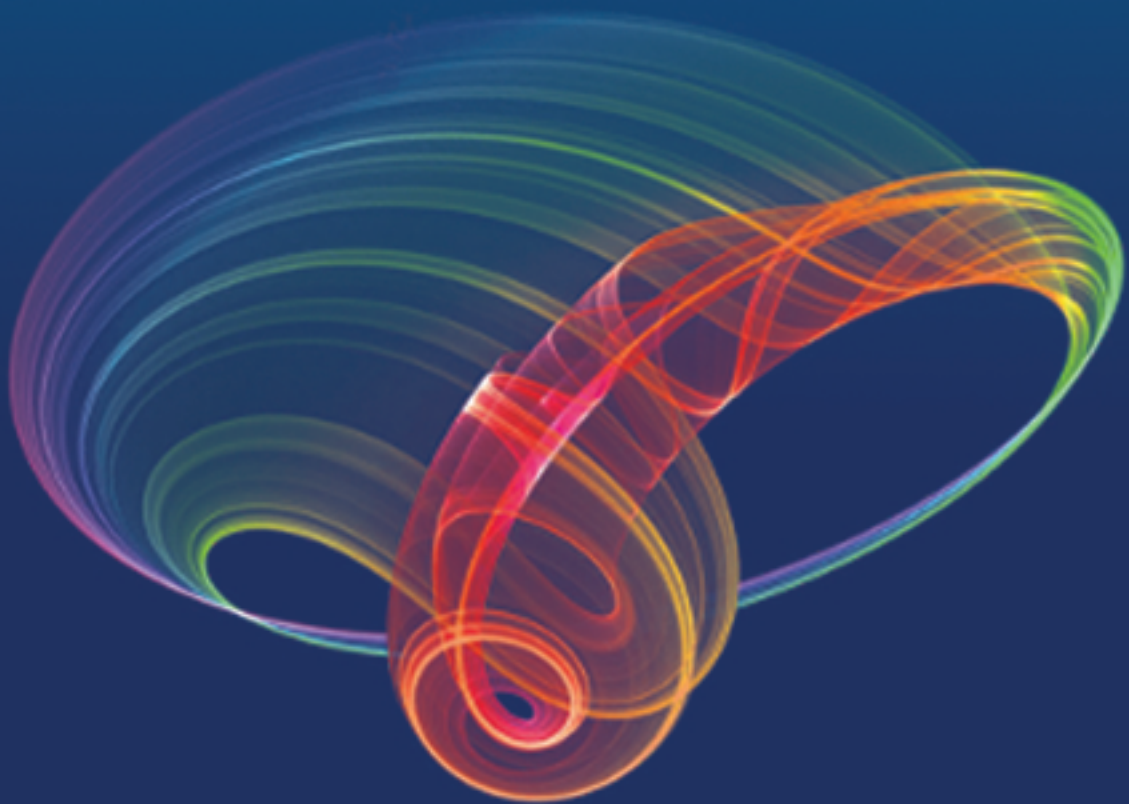
A SiteOrigin Theme

IV International School and Conference on Photonics
August 26 - 30. 2013, Belgrade, Serbia

www.photonica.ac.rs

PHOTONICA'13

and joint COST actions BM1205 and MP1204
training school



Organized by the Institute of Physics, University of Belgrade,
Pregrevica 118, 11080, Belgrade, Serbia

Committees

Scientific Committee

Arlene D. Wilson-Gordon, Israel
Boris Malomed, Israel
Branislav Jelenković, Serbia
Dejan Milošević, Bosnia and Herzegovina
Detlef Kip, Germany
Dragan Indjin, United Kingdom
Feng Chen, China
Gaetano Mileti, Switzerland
Giorgos Tsironis, Greece
Goran Pichler, Croatia
Ian Bennion, United Kingdom
Jelena Radovanović, Serbia
Kurt Hingerl, Austria
Laurentius Windholz, Austria
Ljupčo Hadžievski, Serbia
Milutin Stepić, Serbia
Milivoj Belić, Qatar
Nikola Burić, Serbia
Paul Harrison, United Kingdom
Radoš Gajić, Serbia
Sergei Turitsyn, United Kingdom
Slobodan Vuković, Serbia
Stefka Cartaleva, Bulgaria
Vladimir Škarka, France

Organizing Committee

Institute of Physics, Belgrade (IPB)

[Radoš Gajić](#) (Chair)
[Radmila Panajotović](#) (Secretary)
Branislav Jelenković
Jelena Pešić
Dragana Jović
Dejan Timotijević
Goran Isić
Marijana Milićević
Vesna Vučić
Andjela Beltaos
Djordje Jovanović
[Duška Popović](#) (Manuscript submission)

Serbian Academy of Sciences and Arts, Belgrade (SASA), [Milena Ivanović](#)

Vinča Institute of Nuclear Sciences, Belgrade (NI Vinca)

Ljupčo Hadžievski
Suzana Petrović
Milan Trtica
[Mihajlo Mudrinić](#) (WEB Master)
Aleksandra Maluckov

Faculty of Technical Sciences, Novi Sad (FTS Novi Sad)

Miloš Živanov

School of Electrical Engineering, Belgrade (SEE)

[Jelena Radovanović](#) (COST Actions)
Pedja Mihailović
Jovan Elazar

Faculty of Physics, Belgrade (FF) Bratislav Obradović

Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy (IHTM), Belgrade

Zoran Jakšić
Slobodan Vuković

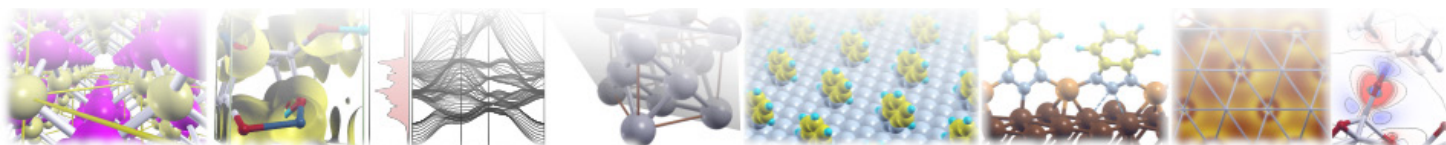


QUANTUM ESPRESSO

September 15–20, 2019

Ljubljana, Slovenia

Summer School on Advanced Materials and Molecular Modelling



BOOK OF ABSTRACTS

September 15 – 20, 2019

Jožef Stefan Institute, Ljubljana



QUANTUM ESPRESSO
FOUNDATION



DRIVING
THE EXASCALE
TRANSITION



Jožef Stefan
Institute
Ljubljana, Slovenija



Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire



EUROTECH

Imagine. Build. Succeed.

BOOK OF ABSTRACTS: Quantum ESPRESSO Summer School on Advanced Materials and Molecular Modelling

Publisher:
Jožef Stefan Institute, Jamova 39, Ljubljana, Slovenia

Edited by:
Anton Kokalj and Matjaž Dlouhy

Layout by Matjaž Dlouhy and Anton Kokalj
Authors of the front page: Anton Kokalj and Matjaž Dlouhy

Kataložni zapis o publikaciji (CIP) pripravili v Narodni in univerzitetni knjižnici v Ljubljani
COBISS.SI-ID=301641728
ISBN 978-961-264-154-2 (pdf)

This book of abstracts is available online at <http://qe2019.ijs.si/qe2019-book-of-abstracts.pdf>

Ljubljana, Slovenia, 2019

School Motivation

The aim of the *Summer School on Advanced Materials and Molecular Modelling with Quantum ESPRESSO* is to introduce students, postdocs, and other researchers to materials and molecular modelling with **QUANTUM ESPRESSO**. The school covers basic concepts as well as recent advances and developments, with emphasis on density-functional-theory based methods and high-performance computing. It follows a two-decade-long tradition of **QUANTUM ESPRESSO** training courses that have been held all over the world and is part of an ongoing effort of the MaX CoE to widen the scope of its action to European countries outside the consortium.

Sponsors



Organizers

Stefano Baroni (SISSA, Trieste)

Anton Kokalj (Jožef Stefan Institute, Ljubljana)

Ivor Lončarić (Ruđer Bošković Institute, Zagreb)

Antun Balaž (Institute of Physics Belgrade)

Acknowledgments

A special acknowledgment goes to:

Matic Poberžnik (organization & logistics, implementation of school virtual-machine),

Matjaž Dlouhy (organization & logistics),

Jan Jona Javoršek and **Barbara Krašovec** (for support concerning HPC facilities),

Barbara Kapun, Dolores Zimerl, Tatjana Močnik and **Francesca Garofalo** (administration),

Networking Infrastructure Centre for making the HPC facilities available for the school,

Department of Knowledge Technologies (E8) and Department of Communication Systems (E6)
for making their video-classroom available for the school,

and all others who contributed.

Help from personnel of the Department of Physical and Organic Chemistry at Jožef Stefan Institute is much appreciated and acknowledged.

Special Guest Lecturers

Željko Šljivančanin (*Institute of Nuclear Sciences, Vinča*)

Iurii Timrov (*EPLF, Lausanne*)

Dino Novko (*Institute of Physics, Zagreb*)

Lecturers

Stefano Baroni (*SISSA, Trieste*)

Anton Kokalj (*Jožef Stefan Institute, Ljubljana*)

Paolo Giannozzi (*DMIF, Udine*)

Pietro Delugas (*SISSA, Trieste*)

Iurii Timrov (*EPLF, Lausanne*)

Giovanni Pizzi (*EPLF, Lausanne*)

Carlo Cavazzoni (*CINECA, Bologna*)

Pietro Bonfa (*Università degli Studi di Parma, Parma*)

Tutors

Andrea Urru (*SISSA, Trieste*)

Yusuf Shaidu (*SISSA, Trieste*)

Oscar Baseggio (*SISSA, Trieste*)

Nicola Spallanzani (*CINECA, Bologna*)

Matic Poberžnik (*Jožef Stefan Institute, Ljubljana*)

Matej Huš (*National Institute of Chemistry, Ljubljana*)

Drejc Kopač (*National Institute of Chemistry, Ljubljana*)

Andrijana Solajić (*Institute of Physics, Belgrade*)

Jelena Pešić (*Institute of Physics, Belgrade*)

Milan Jocić (*Institute of Physics, Belgrade*)

Srđan Stavrić (*Institute of Nuclear Sciences, Belgrade*)

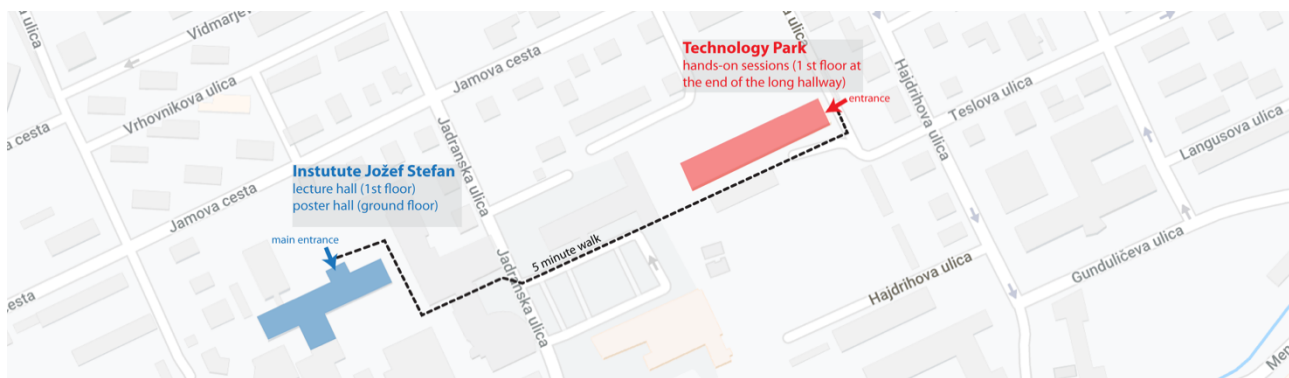
Where & When?

QE 2019 Summer School Summer School on Advanced Materials and Molecular Modelling with Quantum ESPRESSO takes place at the Jožef Stefan Institute (Jamova 39, Ljubljana, Slovenia) from 15 to 20 September 2019.

In particular:

- **lectures** take place at lecture hall @ Jožef Stefan Institute (blue colored on below map),
- **hands-on exercises** take place at video classroom @ Technology Park (red colored).

Venue map



Map of restaurants and canteens



Program of the QE-2019 Summer School

Color code: **Lecture** (lecture-hall) **Hands-on** (classroom)

DAY 0: Sunday, September 15 (Basic introductory lectures)

14:00 – 14:45	Anton Kokalj <i>A chemist view of bonding & a very informal intro to Bloch theorem: from molecules to solids and back</i>
14:45 – 15:00	Coffee break
15:00 – 18:00	Stefano Baroni <i>Broad overview of theoretical methods: DFT, pseudopotentials, plane waves. Finite vs. infinite systems: supercells and k-points. Signal analysis: FFTs and the Nyquist-Shannon theorem.</i>
	Registration
18:00 – 19:00	Small welcome party: snacks & beverages

DAY 1: Monday, September 16

8:00 – 8:50	Registration & participant's computer setup check
8:50 – 9:00	Opening remarks & general instructions
9:00 – 10:30	Paolo Giannozzi and Pietro Delugas <i>Quantum ESPRESSO: overview and basic functionalities. The self-consistent cycle. PBC: supercells and k-point sampling.</i>
10:30 – 11:00	Coffee break
11:00 – 12:30	Paolo Giannozzi and Pietro Delugas (contd). <i>Charge densities and potentials. Systems in 0-1-2-3D. Metals vs. insulators. Non-magnetic vs. magnetic systems.</i>
12:30 – 14:00	Lunch
14:00 – 14:30	Participant's computer setup check (contd).
14:30 – 18:00	Hands-on. Anton Kokalj, Pietro Delugas, Andrea Urru, Matic Poberžnik, Andrijana Solajić, Jelena Pešić <i>Installation. SCF + basic post-processing. XCrySDen, PWgui, QE-emacs-modes, PWTk (basics). Exercises.</i>
18:00 – 18:30	Coffee break
18:30 – 19:30	Special guest lecture – Željko Šljivančanin <i>A short introduction to physics and chemistry at crystalline surfaces</i>

DAY 2: Tuesday, September 17

9:00 – 10:30	Paolo Giannozzi and Anton Kokalj <i>Forces, stresses, geometry optimisation. Chasing saddle points: the NEB method</i>
10:30 – 11:00	Coffee break
11:00 – 12:30	Paolo Giannozzi <i>Advanced functionals: higher accuracy (hybrids), strongly correlated materials (DFT+U), weakly bound systems (van der Waals)</i>
12:30 – 14:00	Lunch
14:00 – 18:00	Hands-on. Anton Kokalj, Iurii Timrov, Yusuf Shaidu, Matic Poberžnik, Matej Huš, Srdjan Stavrić <i>Optimizations, NEB, functionals. Automating the workflow with PWTk.</i>
18:00 – 18:30	Coffee break

18:30 – 19:30	Special guest lecture – Iurii Timrov <i>First-principles quantum simulations of correlated materials using Hubbard-corrected density-functional (perturbation) theory</i>
----------------------	---

DAY 3: Wednesday, September 18

9:00 – 10:30	Stefano Baroni <i>Density-functional perturbation theory: phonons</i>
10:30 – 11:00	Coffee break
11:00 – 12:30	Iurii Timrov <i>Time-dependent density-functional (perturbation) theory: optical absorption and electron energy loss spectroscopies</i>
12:30 – 14:00	Lunch
14:00 – 18:00	Hands-on. Iurii Timrov, Oscar Baseggio, Andrea Urru, Milan Jocić <i>(TD) DFPT</i>
18:00 – 18:30	Coffee break
18:30 – 21:00	Elevator pitches + poster session (part I)

DAY 4: Thursday, September 19

9:00 – 10:30	Giovanni Pizzi <i>High-throughput computing with the AiiDA platform</i>
10:30 – 11:00	Coffee break
11:00 – 12:30	Hands-on. Giovanni Pizzi, Nicola Spallanzani, Pietro Bonfà <i>Hands-on AiiDA</i>
12:30 – 14:00	Lunch
14:00 – 16:30	Hands-on. Giovanni Pizzi, Nicola Spallanzani, Pietro Bonfà <i>Hands-on AiiDA</i>
16:30 – 17:00	Coffee break
17:00 – 18:00	Special guest lecture – Dino Novko <i>Equilibrium and ultrafast vibrational dynamics from first principles</i>
18:00 – 18:30	Coffee break
18:30 – 21:00	Elevator pitches + poster session (part II)

DAY 5: Friday, September 20

9:00 – 10:30	Carlo Cavazzoni and Pietro Bonfà <i>Quantum ESPRESSO on HPC and GPU systems: parallelisation and hybrid architecture</i>
10:30 – 11:00	Coffee break
11:00 – 12:30	Hands-on. Pietro Bonfà, Carlo Cavazzoni, Pietro Delugas, Drejč Kopač, Milan Jocić <i>Hands-on QE on HPC and GPU systems</i>
12:30 – 14:00	Lunch
14:00 – 16:30	Hands-on. Pietro Bonfà, Carlo Cavazzoni, Pietro Delugas, Drejč Kopač, Milan Jocić <i>Hands-on QE on HPC and GPU systems</i>
16:30 – 16:45	Break
16:45 – 17:00	Poster prize award & Closing remarks

Linz, 2022-09-26

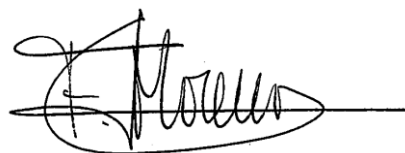
To Whom it may concern

Ref: Confirmation of Invited talk at the Meta 2022

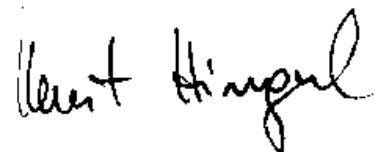
Dear Sir or Madam,

As organizers (Dr. Maria Losurdo, Prof. Fernando Moreno and me) of the Special Session on SP7, <https://metaconferences.org/META/index.php/META2022/sessions> "Challenges of Phase Change Materials and Plasmonics for Nanophotonics" at the metamaterials conference 2022 in Torremolinos, Spain, and the related "School on Phase Change Materials", <http://www.phemtronics.eu/events.html> we confirm that Dr. Jelena Pesic has given an extended tutorial as well as an invited talk on Density Functional Theory with special emphasis on modelling Phase Change Materials. She has combined an didactical approach on teaching Computational Material Science with the presentation of her latest research results and the impact and resonance from the attendees has been extremely positive.

With best regards



Fernando Moreno



Kurt Hingerl

Maria Losurdo



PHEMTRONICS SCHOOL PROGRAM

July 17, SUNDAY: FUNDAMENTAL CONCEPTS

08:00-8:15 Registration and Opening: PHEMTRONICS SCHOOL

08:15-10:00 O. Muskens -*Fundamentals of Plasmonics*

10:00-10:30 Coffee break

10:30-12:15 T. Taubner -*Introduction and Optical Properties of PCMs: from THz to VIS*

12:15-14:00 D. Wright -*Coupling with PCM*

Lunch

15:30-17:15 J. Pestic -*Density functional theory calculations for PCM: basic concepts and applications*

17:15-17:45 Coffee break

17:45-19:30 K. Hingerl -*Phase Transition in PCMs: Basic thermodynamic concepts*

July 18, MONDAY: APPLICATIONS/INDUSTRIAL&COMPANY VIEWS

08:30-10:15 M. Wuttig -*Chemistry of PCMs: Bonds and design of PCM*

10:15-10:45 Coffee break

10:45-12:30 W. Pernice -*PCM Engineering: Computing and Neuromorphic networks*

12:30-14:15 H. Bhaskaran -*Perspective of PCM applications: A company vision*

Concluding remarks

Lunch

PLACE: *Palacio de Congresos de Torremolinos (<https://palacio-congresos.es/en/home-2/>), Sala Manantiales (Manantiales room, <https://palacio-congresos.es/en/manantiales-room/>).*

NOTE: *Each lecture is composed of two parts with a break of 15 minutes.*



**JOHANNES KEPLER
UNIVERSITÄT LINZ**

Prof. DI Dr. Kurt Hingerl
Zentrum für Oberflächen- und
Nanoanalytik

T +43 732 2468 5801
F +43 732 2468 5816
kurt.hingerl@jku.at

Sekretariat:
Evelyn Sonntag
DW 5800
evelyn.sonntag@jku.at

Erasmus Office
Mrs. Marina Kostrica
University of Belgrade

Linz, 2020-01-10

Re: Invitation for Lectures to Dr. Jelena Pesic at Johannes Kepler University Linz

Dear Madam, dear Sir,

I hereby invite to Dr. Jelena Pesic to give in total 4 lectures and seminars from the 2nd to the 6th of March (summer term) 2020. We ask Jelena to treat in the lectures the following preferred topics:

1. An introductory lecture to Density Functional Theory.
2. An introductory lecture to 2D semiconductor materials.
3. Lattice dynamics and vibrational properties of 2D semiconductor materials.
4. Evidence of Spin-Phonon coupling

yours sincerely

Univ. Prof. Dr. Kurt Hingerl

**JOHANNES KEPLER
UNIVERSITÄT LINZ**
Altenberger Straße 69
4040 Linz, Österreich
www.jku.at
DVR 0093696



Mobility Agreement

Staff Mobility For Teaching¹

Planned period of the teaching activity: from 02/03/2020 till 06/03/2020

Duration (days) – excluding travel days: five

The teaching staff member

Last name (s)	Pesic	First name (s)	Jelena
Seniority ²	junior	Nationality ³	serbian
Sex [M/F]	F	Academic year	2019/2020
E-mail	yelena@ipb.ac.rs		

The Sending Institution/Enterprise⁴

Name	University of Belgrade		
Erasmus code ⁵ (if applicable)	RS BELGRAD02	Faculty/Department	Institute of Physics
Address	Studentski trg 1, 11000 Belgrade	Country/ Country code ⁶	Serbia/RS
Contact person name and position	Marina Kostrica, Rectorate	Contact person e-mail / phone	kostrm@rect.bg. ac.rs
Type of enterprise:	State University	Size of enterprise (if applicable)	<input type="checkbox"/> <250 employees <input type="checkbox"/> >250 employees

The Receiving Institution

Name	Johannes Kepler University Linz	Faculty/Department	Faculty of Engineering and Natural Sciences
Erasmus code (if applicable)	A LINZ01		
Address	Altenberger Str. 69	Country/ Country code	Austria/040
Contact person name and position	Christine Hinterleitner	Contact person e-mail / phone	christine. hinterleitner@jku.



	International office		at
--	----------------------	--	-----------

For guidelines, please look at the end notes on page 3.



Section to be completed BEFORE THE MOBILITY

I. PROPOSED MOBILITY PROGRAMME

Main subject field⁷: 0533 (Physics)

Level (select the main one): Short cycle (EQF level 5) ; Bachelor or equivalent first cycle (EQF level 6) ; Master or equivalent second cycle (EQF level 7) ; Doctoral or equivalent third cycle (EQF level 8)

Number of students at the receiving institution benefiting from the teaching programme:
20

Number of teaching hours: 8

Language of instruction: English

Overall objectives of the mobility:

The proposed mobility has two important goals. Students at JKU will be introduced with recent advances within field of research of two-dimensional materials. And the lecturer expects to be introduced to current teaching and research methods at JKU.

Also, additional goal comes from the fact the lecturer will also present her experiences and impressions from the point of young researcher. This could be useful for students to talk about perspectives after obtaining highest degree in STEM and to hear from the "first hand" advices what to expect after finishing PhD.

Added value of the mobility (in the context of the modernisation and internationalisation strategies of the institutions involved):

The networks established through the Erasmus+ exchange in Linz will be stable and reliable and they lays the ground for a further cooperation in research projects or joint publications. The mobility serves exactly for the porpoises of boosting international cooperation. Perspective gained during this exchange will improve cooperation between the science and industry on a regional and national level which should lead to effective collaborations within global industries.

Besides the impact on academic and professional development of both students and the lecturer there is important impact on mutual understanding of individuals from different nations, the personal and face-to-face cooperation of both lecturers and students.

Content of the teaching programme:

Theoretical study of 2D materials using density functional theory (DFT)– basics of DFT and specificities of using DFT for research of 2D materials.

2D materials beyond graphene – overview of 2D semiconductor materials, families of 2D materials and basics of van der Waals heterostructures.

Examples of DFT study of representative 2D semiconductor materials: vibrational properties and lattice dynamics and perspective on experimental study.

Evidence of spin-phonon and electron-phonon coupling – overview



Expected outcomes and impact (e.g. on the professional development of the teaching staff member and on the competences of students at both institutions):

The lecturer will gain additional experience in teaching. She will also see new ways of implementation of computational physical in experimental research. The students will hear about rapidly developing methods for calculations in solid-state physics. They will gain new ideas which may be used in their field of study/research. Both parties will make new international connections. Both parties will exchange ideas across disciplines. Some of the students may become interested in visiting University of Belgrade.

II. COMMITMENT OF THE THREE PARTIES

By signing⁸ this document, the teaching staff member, the sending institution/enterprise and the receiving institution confirm that they approve the proposed mobility agreement.

The sending higher education institution supports the staff mobility as part of its modernisation and internationalisation strategy and will recognise it as a component in any evaluation or assessment of the teaching staff member.

The teaching staff member will share his/her experience, in particular its impact on his/her professional development and on the sending higher education institution, as a source of inspiration to others.

The teaching staff member and the beneficiary institution commit to the requirements set out in the grant agreement signed between them.

The teaching staff member and the receiving institution will communicate to the sending institution/enterprise any problems or changes regarding the proposed mobility programme or mobility period.

The teaching staff member

Name: Jelena Pesic

Signature: *Jelena Pesic*

Date:



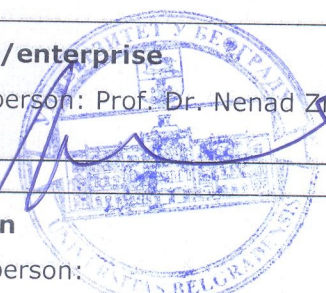
The sending institution/enterprise

Name of the responsible person: Prof. Dr. Nenad Zrnčić, Vice-Rector

Signature: *Nenad Zrnčić*

Date:

09 JAN 2020



The receiving institution

Name of the responsible person:

Signature:

Date:

¹ In case the mobility combines teaching and training activities, **this template** should be used and adjusted to fit both activity types.

² **Seniority:** Junior (approx. < 10 years of experience), Intermediate (approx. > 10 and < 20 years of experience) or Senior (approx. > 20 years of experience).

³ **Nationality:** Country to which the person belongs administratively and that issues the ID card and/or passport.

⁴ All references to "**enterprise**" are only applicable to mobility for staff between Programme Countries or within Capacity Building projects.

⁵ **Erasmus Code:** A unique identifier that every higher education institution that has been awarded with the Erasmus Charter for Higher Education receives. It is only applicable to higher education institutions located in Programme Countries.



⁶ **Country code:** ISO 3166-2 country codes available at: <https://www.iso.org/obp/ui/#search>.

⁷ The [ISCED-F 2013 search tool](http://ec.europa.eu/education/tools/isced-f_en.htm) (available at http://ec.europa.eu/education/tools/isced-f_en.htm) should be used to find the ISCED 2013 detailed field of education and training.

⁸ Circulating papers with original signatures is not compulsory. Scanned copies of signatures or electronic signatures may be accepted, depending on the national legislation of the country of the sending institution (in the case of mobility with Partner Countries: the national legislation of the Programme Country). Certificates of attendance can be provided electronically or through any other means accessible to the staff member and the sending institution.

Im Rahmen des Kolloquiums des Zentrums für Oberflächen- und Nanoanalytik spricht

Frau Dr. Jelena Pesic,
Assistant Research Professor, Institute of Physics Belgrade,
University of Belgrade

über

Theoretical and experimental research of low-dimensional materials at Laboratory for graphene, other 2D materials and ordered nanostructures at Institute of Physics Belgrade, Serbia

The first part of will be a brief overview of the theoretical and experimental research of low-dimensional materials, conducted at Graphene laboratory at Institute of Physics at Belgrade. In the second part of the talk computational studies, based of density functional theory formalism, of electronic and vibrational properties of graphene and related low-dimensional systems, will be presented.

Subject [Indico] Abstract Acceptance notification (#15)
From <noreply@orion.hpc.uevora.pt>
To <yelena@ipb.ac.rs>
Date 2023-01-28 12:33



Dear Jelena Pesic,

We're pleased to announce that your abstract "Lattice Dynamics in Ferrimagnetic Layered van der Waals Material Mn₃Si₂Te₆" with ID #15 has been accepted in track "" (Contributed Talk).

See below a summary of your submitted abstract:

Conference: Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP) Ecosystem

Submitted by: Jelena Pesic

Title: Lattice Dynamics in Ferrimagnetic Layered van der Waals Material Mn₃Si₂Te₆

Primary Authors: Jelena Pešić, Andrijana Šolajić, Sanja Djurdjić, Yu Liu, Cedomir Petrovic, Michel Bockstedte, Alberta Bonanni, Zoran Popović, Nenad Lazarević

Co-authors:

Track classification:

Presentation type: Contributed Talk

For a more detailed summary please visit the page of your abstract:

<https://indico.hpc.uevora.pt/event/39/abstracts/45/>

Kind regards,

The organizers of Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP) Ecosystem

--

Indico :: Call for Abstracts

<https://indico.hpc.uevora.pt/event/39/>

WILEY

Reviewer Certificate

This certificate is awarded to

JELENA PEŠIĆ

for serving as a reviewer for

Annalen der Physik



Thank you for reviewing 1 manuscript in 2021

29 March 2022

Huan Wang
Deputy Editor

Stefan Hildebrandt
Editor-in-Chief



Subject Thank you for reviewing for Surface Science
From Surface Science <em@editorialmanager.com>
Sender <em.susc.0.7139b4.c1cb670c@editorialmanager.com>
To Jelena Pesic <yelena@ipb.ac.rs>
Reply-To Surface Science <susc@elsevier.com>
Date 2021-02-09 15:50

[REDACTED]

[REDACTED]

[REDACTED]

Dear Pesic,

Thank you for reviewing the above referenced manuscript. I greatly appreciate your contribution and time, which not only assisted me in reaching my decision, but also enables the author(s) to disseminate their work at the highest possible quality. Without the dedication of reviewers like you, it would be impossible to manage an efficient peer review process and maintain the high standards necessary for a successful journal.

You will shortly receive a notification from Elsevier's reviewer recognition platform, which provides you with a link to your "My Elsevier Reviews" private profile page, certificates, editor recognition as well as discounts for Elsevier services.

I hope that you will consider Surface Science as a potential journal for your own submissions in the future.

As a token of appreciation, we would like to provide you with a review recognition certificate on Elsevier Reviewer Hub (reviewerhub.elsevier.com). Through the Elsevier Reviewer Hub, you can also keep track of all your reviewing activities for this and other Elsevier journals on Editorial Manager.

If you have not yet activated your 30 day complimentary access to ScienceDirect and Scopus, you can still do so via the [Rewards] section of your profile in Reviewer Hub (reviewerhub.elsevier.com).

You can always claim your 30-day access period later, however, please be aware that the access link will expire six months after you have accepted to review.

Kind regards,

Hendrik Bluhm

Editor

Surface Science

More information and support

You will find guidance and support on reviewing, as well as information including details of how Elsevier recognises reviewers, on Elsevier's Reviewer Hub: <https://www.elsevier.com/reviewers>

FAQ: How can I reset a forgotten password?

https://service.elsevier.com/app/answers/detail/a_id/28452/supporthub/publishing/kw/editorial+manager/

For further assistance, please visit our customer service site: <https://service.elsevier.com/app/home/supporthub/publishing/>. Here you can search for solutions on a range of topics, find answers to frequently asked questions, and learn more about Editorial Manager via interactive tutorials. You can also talk 24/7 to our customer support team by phone and 24/7 by live chat and email.



Subject Thank You - [REDACTED]
From Applied Nanoscience (APNA) <em@editorialmanager.com>
Sender <em.apna.0.7ab40c.892408ab@editorialmanager.com>
To Jelena Pestic <yelena@ipb.ac.rs>
Reply-To Applied Nanoscience (APNA) <sruthi.selvaraj@springer.com>
Date 2022-04-17 00:14

Dear Dr. Pestic,

[REDACTED]

We greatly appreciate your assistance.

With kind regards,
Journals Editorial Office
Springer

This letter contains confidential information, is for your own use, and should not be forwarded to third parties.

Recipients of this email are registered users within the Editorial Manager database for this journal. We will keep your information on file to use in the process of submitting, evaluating and publishing a manuscript. For more information on how we use your personal details please see our privacy policy at <https://www.springernature.com/production-privacy-policy>. If you no longer wish to receive messages from this journal or you have questions regarding database management, please contact the Publication Office at the link below.

In compliance with data protection regulations, you may request that we remove your personal registration details at any time. (Use the following URL: <https://www.editorialmanager.com/apna/login.asp?a=r>). Please contact the publication office if you have any questions.



Subject Thank you for the review of [REDACTED]
From Hong Zhang <eesserver@eesmail.elsevier.com>
Sender <eesserver@eesmail.elsevier.com>
To <yelena@ipb.ac.rs>
Reply-To Hong Zhang <hongzhang@scu.edu.cn>
Date 2019-11-20 14:40

*** Automated email sent by the system ***

[REDACTED]
Physica B

Dear Dr. Jelena Pesic,

Thank you for your review of this manuscript.

You may access your review comments and the decision letter (when available) by logging onto the Elsevier Editorial System at <https://ees.elsevier.com/physb/>. Please login as a Reviewer:

Your username is: yelena@ipb.ac.rs

For security reasons your password is not given in this e-mail. To retrieve it please click the "send password" link on the login page.

If you have not yet activated or completed your 30 days of access to Scopus and ScienceDirect, you can still access them via this link:

http://scopees.elsevier.com/ees_login.asp?journalacronym=PHYSB&username=yelena@ipb.ac.rs

You can use your EES password to access Scopus and ScienceDirect via the URL above. You can save your 30 days access period, but access will expire 6 months after you accepted to review.

Kind regards,

Hong Zhang
Editor
Physica B

For any technical queries about using EES, please contact Elsevier Reviewer Support at reviewersupport@elsevier.com



Subject Thank you for the review of [REDACTED]
From Hong Zhang <eesserver@eesmail.elsevier.com>
Sender <eesserver@eesmail.elsevier.com>
To <yelena@ipb.ac.rs>
Reply-To Hong Zhang <hongzhang@scu.edu.cn>
Date 2020-01-28 12:23

*** Automated email sent by the system ***

[REDACTED]

Dear Dr. Jelena Pesic,

Thank you for your review of this manuscript.

You may access your review comments and the decision letter (when available) by logging onto the Elsevier Editorial System at <https://ees.elsevier.com/physb/>. Please login as a Reviewer:

Your username is: yelena@ipb.ac.rs

For security reasons your password is not given in this e-mail. To retrieve it please click the "send password" link on the login page.

If you have not yet activated or completed your 30 days of access to Scopus and ScienceDirect, you can still access them via this link:

http://scopees.elsevier.com/ees_login.asp?journalacronym=PHYSB&username=yelena@ipb.ac.rs

You can use your EES password to access Scopus and ScienceDirect via the URL above. You can save your 30 days access period, but access will expire 6 months after you accepted to review.

Kind regards,

Hong Zhang
Editor
Physica B

For any technical queries about using EES, please contact Elsevier Reviewer Support at reviewersupport@elsevier.com



Subject Thank you for the review of [REDACTED]
From Tunna Baruah <em@editorialmanager.com>
Sender <em.physb.be60.71ff4b.b9672e12@editorialmanager.com>
To Jelena Pesic <yelena@ipb.ac.rs>
Reply-To Tunna Baruah <tbaruah_physcab@utep.edu>
Date 2021-03-16 17:53

[REDACTED]

Dear Dr. Jelena Pesic,

Thank you for your review of this manuscript.

You may access your review comments and the decision letter (when available) by logging onto the Editorial Manager at <https://www.editorialmanager.com/physb/>. Please login as a Reviewer:

Your username is: yelena@ipb.ac.rs

For security reasons your password is not given in this e-mail. To retrieve it please click the "send password" link on the login page.

As a token of appreciation, we would like to provide you with a review recognition certificate on Elsevier Reviewer Hub (reviewerhub.elsevier.com). Through the Elsevier Reviewer Hub, you can also keep track of all your reviewing activities for this and other Elsevier journals on Editorial Manager.

If you have not yet activated your 30 day complimentary access to ScienceDirect and Scopus, you can still do so via the [Rewards] section of your profile in Reviewer Hub (reviewerhub.elsevier.com). You can always claim your 30-day access period later, however, please be aware that the access link will expire six months after you have accepted to review.

Kind regards,

Tunna Baruah, Ph.D.
Editor
Physica B: Physics of Condensed Matter

For any technical queries about using EM, please contact Elsevier Reviewer Support at reviewersupport@elsevier.com

In compliance with data protection regulations, you may request that we remove your personal registration details at any time. (Use the following URL: <https://www.editorialmanager.com/physb/login.asp?a=r>). Please contact the publication office if you have any questions.



Subject Thank you for the review of [REDACTED]
From Tunna Baruah <em@editorialmanager.com>
Sender <em.physb.be60.7bfff4.ef5d85ae@editorialmanager.com>
To Jelena Pesic <yelena@ipb.ac.rs>
Reply-To Tunna Baruah <tbaruah_physcab@utep.edu>
Date 2022-06-15 00:21

[REDACTED] A

Dear Dr. Jelena Pesic,

Thank you for your review of this manuscript.

You may access your review comments and the decision letter (when available) by logging onto the Editorial Manager at <https://www.editorialmanager.com/physb/>. Please login as a Reviewer:

Your username is: yelena@ipb.ac.rs

For security reasons your password is not given in this e-mail. To retrieve it please click the "send password" link on the login page.

As a token of appreciation, we would like to provide you with a review recognition certificate on Elsevier Reviewer Hub (reviewerhub.elsevier.com). Through the Elsevier Reviewer Hub, you can also keep track of all your reviewing activities for this and other Elsevier journals on Editorial Manager.

If you have not yet activated your 30 day complimentary access to ScienceDirect and Scopus, you can still do so via the [Rewards] section of your profile in Reviewer Hub (reviewerhub.elsevier.com). You can always claim your 30-day access period later, however, please be aware that the access link will expire six months after you have accepted to review.

Kind regards,

Tunna Baruah, Ph.D.
Editor
Physica B: Physics of Condensed Matter

For any technical queries about using EM, please contact Elsevier Reviewer Support at reviewersupport@elsevier.com

#REV_PHYSB#

To ensure this email reaches the intended recipient, please do not delete the above code

In compliance with data protection regulations, you may request that we remove your personal registration details at any time. (Use the following URL: <https://www.editorialmanager.com/physb/login.asp?a=r>). Please contact the publication office if you have any questions.



**21th International Workshop on Computational Physics and Materials Science: Total Energy
and Force Methods | (SMR 3814)**

11 Jan 2023 - 13 Jan 2023
ICTP, Trieste, Italy

P01 - ABDURRAZAQ Abdulgaffar

Tricking germanium to open the band gap

P02 - ACHEHBOUNE Mohamed

Atomic scale nucleation and formation mechanism of hexagonal boron nitride (hBN) on graphene and Germanium : A DFT study

P03 - ADAK Abhishek Kumar

Insights from density functional theory into the formation and rotation of an enantiospecific assembly of molecular raffle wheels

P04 - ARTACHO CORTÉS Martin Emilio Martin

Floquet Theory of Electronic Stopping of nuclei projectiles in solids

P05 - ASHANI Mitonji Timothy

Exploring plasmon properties of the Dirac compound LiNa₂Bi using TDDFT.

P06 - ATAEL Seyedeh Samaneh

Interlayer Excitons in 2D TMD Heterostructures

P07 - ATTIA Mahmoud Mostafa Elsayed

Li vs. Na Solid-State based Batteries : Modelling of Diffusion in Solid Electrolytes

P08 - AZIZI Khatereh

Investigation of the structural complexity of aqueous systems through machine learning

P09 - BANERJEE Debarshi

Development of a computational toolbox to analyse first-passage times and diffusion coefficients in heterogeneous soft-matter systems

P10 - BHATTACHARYA Sanchari

Signature of cubic and linear Rashba in LaAlO₃/KTaO₃ (0 0 1) heterostructure

P11 - BIDOGGIA Davide

Ab-initio characterization of CoTPyP and CoTPyP-Co metalorganic monolayers for catalytic application

P12 - BINCI Luca

Noncollinear relativistic Hubbard parameters and DFT+U with ultrasoft pseudopotentials

P13 - BONACCI Miki

Automated Many-Body Perturbation Theory

P14 - BORGHESI Costanza

Tailoring High-Entropy Oxides (HEOs) as Emerging Radiative Materials for Green Energy Buildings

P15 - BOUHRIT Abir

The effect of vacancies on the thermoelectric properties of half-Heusler materials

P69 - MONACELLI Lorenzo

Computing the phase diagram of strongly anharmonic crystals. CsSnI₃: the route to eco-friendly solar cells

P70 - MORRESI Tommaso

Anharmonic Phonons From Path Integral Molecular Dynamics Simulations

P71 - MULWA Winfred Mueni

Atomistic Study of an Ideal Thermoelectric Contact: the Full – Heusler / Half – Heusler Interface

P72 - MUŽEVIĆ Matko

Tuning of MoS₂ band structure with atom intercalation during synthesis

P73 - NEUPANE Krishna Hari

Effect of N & C sites vacancy defects in (G/h-BN) HS of 2D materials

P74 - NGUYEN Truong Truong Long

Structural prediction of group IV monochalcogenides and their pressure-induced transitions mechanism

P75 - NKOU Falonne Bertholde Sharone

Selective oxidation of ethylene glycol on transition metal oxide under dry and humid conditions from ab-initio molecular dynamics approach

P76 - NOURBAKHSH Zahra

An ab initio supercell approach for high-harmonic generation in liquids

P77 - NUNEZ AVILA Jose Andres

Lattice dynamics and electron-phonon coupling in Fe_{1-x}Co_xGe: effects of magnetism

P78 - OMRANPOOR Amir Hossein

Ab initio Molecular Dynamics Study of 2-propanol Oxidation at Co₃O₄(001)/H₂O Interface

P79 - PANDEY Dhanshree

Theoretical Studies On Investigation Of Gas Adsorption and Sensing On 2-Dimensional Surfaces

P80 - PAVLIN Matic

Effects of Solvation on Reduction of Carbon Dioxide on Copper Electrocatalyst

P81 - PEGOLO Paolo

Hydrodynamic contributions to the thermal conductivity of amorphous materials in the infinite-size limit

P82 - PEREIRA CARDOSO Claudia Maria

GW multipole approach for the frequency description of the dielectric screening in metals

P83 - PEŠIĆ Jelena

The Evolution of Vibrational Modes of FeSe Under Uniaxial Strain

P84 - PETERSON Ann Elizabeth Ann

Elucidating the chiral anomaly in Dirac materials via electronic structure calculations

P85 - PEZO LOPEZ Armando Arquimedes

Orbital Hall effect in 2D Dirac materials

P86 - PIRES FERREIRA Pedro

The Evolution of Vibrational Modes of FeSe Under Uniaxial Strain

Jelena Pešić, Andrijana Šolajić, Ana Milosavljević, Sanja Đurđić Mijin, Borislav Vasić, Novica Paunović and Nenad Lazarević

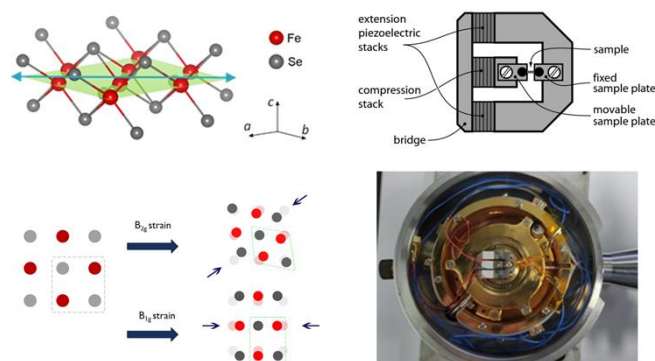
Center for Solid State Physics and New Materials, Institute of Physics Belgrade, Serbia

Application of strain is one of the effective ways to engineer the various properties of materials. Iron-based superconductors are suitable materials to study the strain dependence of physical properties due to their high sensitivity to variations in the local crystal structure. Among the iron-based superconductor family, FeSe is a prominent example of the interplay between superconductivity, magnetism, and electronic nematicity, which can be tuned both by chemical substitution and by application of physical pressure and consequent lattice distortions [1].

Here we present a first principle study of evolution of vibrational modes of the strained FeSe. We performed a systematic computational study, using density functional theory formalism, on bulk FeSe crystals with applying the in-plane uniaxial strain in B_{1g} and B_{2g} symmetry channels, in the range -1.5% to 1.5%. For the calculation, we used the experimental parameters and the volume cell of the unit cell is conserved under applied uniaxial strain [2].

We focus on the effect of the modification of the lattice constant, and the consequent symmetry distortion, on characteristic A_{1g} and B_{1g} modes of FeSe. These findings are compared with experimental data from Raman measurements, studying the trend of changes of A_{1g} and B_{1g} modes with applied strain using a piezoelectric strain device. The sample was mounted in such a way that the strain was applied in the ab -crystallographic plane and that the direction of incident light propagation is along the crystallographic c -axes. The sample orientations were set so that $[110]$ (B_{2g}) and $[100]$ (B_{1g}) crystallographic directions were orthogonal to a gap between the holder plates.

The work was supported by the Science Fund of the Republic of Serbia, PROMIS, No. 6062656, StrainedFeSC [3].

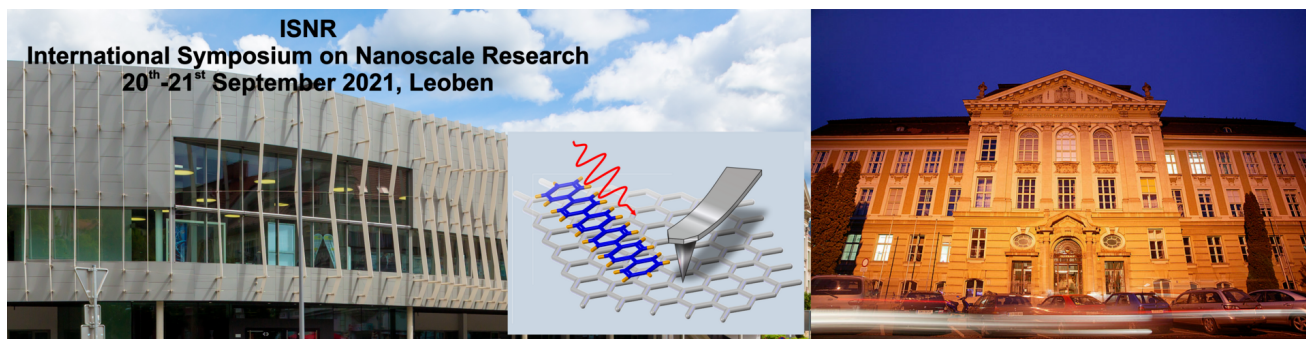


Left: Schematic representation of applied strain, Right: piezoelectric strain device, schematic and photography

[1] M. Ghini et al. Strain tuning of nematicity and superconductivity in single crystals of FeSe, *Physical Review B*, 103, 205139 (2021)

[2] Willa, R. et al. Strain tuning and anisotropic spin correlations in iron-based systems. *Physical Review B*, 100(8) (2019).

[3] <http://strainedfesc.ipb.ac.rs/>



ISNR / Program

Program Overview

Monday September 20th 2021

Keynote speakers:

Keynote I: Prof. Thomas Michely, University of Cologne (DEU)
 Keynote II: Prof. Claudia Draxl, Humboldt-University Berlin (DEU)

Other confirmed speakers:

Prof. Sidney Cohen (online), Weizmann Institute of Science, Rehovot (ISR)
 Dr. Caterina Czibula, Graz University of Technology, Graz (AUT)
 Dr. Gregor Hlawacek, Helmholtz-Zentrum Dresden Rossendorf, Dresden, (DEU)
 Prof. Peter Hosemann (online), University of California Berkeley (USA)
 Dr. Aleksandar Matkovic, Montanuniversitaet Leoben, Leoben (AUT)
 Prof. Bene Poelsema, University of Twente, Enschede (NLD)
 Prof. Robert Schennach, Graz University of Technology, Graz (AUT)
 Prof. Christian Ganser, National Institutes of Natural Sciences, Okazaki (JPN)
 Prof. Wolf Widdra, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Halle (DEU)

Program

This is just a preliminary program. Depending on the developing situation in terms of Corona, participants and abstracts the schedule might change.

Monday September 20 th 2021 (9:30-17:30)						
(Ceremonial act and first part of the symposium)						
	Time	Name	Event	length /minutes	Abstract	Remarks
Registration	8:00-9:30		Registration			Corona
Session I + ceremonial act 9:30-11:00	9:30-9:35	Markus Kratzer Music: Kerstin Feltz, Violoncello, Almut Teichert, Klavier	Opening words + Music	5	Felix Mendelssohn: Lied ohne Worte op. 109	
	9:35-9:40	Prof. Wilfried Eichlseder (Rector of MUL)	Welcoming words	5		
	9:40-9:45	Prof. Oskar Paris (Dean of Studies at MUL) online	Welcoming words	5		online
	9:45-9:50	Prof. Ana Silva (University of Lisbon) Chair of te Nanometer Structure Division of the IUVSTA	Welcoming words	5		
	9:50-9:55	Prof. Vessela Tsakova (Bulgarian Academy of Sciences)	Welcoming words (online)	5		

	9:55-10:00	Kerstin Feltz, Violoncello, Almut Teichert, Klavier	Music	5	Gaspar Cassadó: Tanz des grünen Teufels	
	10:00-10:30	Prof. Thomas Michely (University of Cologne)	Keynote lecture	30	Spectroscopy of Quasi-Freestanding Transition Metal Dichalcogenide Monolayers	
	10:30-11:00	Prof. Claudia Draxl (Humboldt University Berlin)	Keynote lecture	30	From Data Mining to Knowledge:Refining a Precious Raw Material of the 21st Century	
	11:00-11:15		Break	15		
Session II 11:15-12:30	11:15-11:25	Kerstin Feltz, Violoncello, Almut Teichert, Klavier	Music	10	Robert Schumann: Aus den Stücken im Volkston op. 102 Mit Humor-Langsam-Nicht zu rasch	
	11:25-11:40	Prof. Friedemar Kuchar/ Prof. Ronald Meisels (MUL)	Talk	15	From AFM to EUV	
	11:40-11:50	Prof. Erich Kasper (University of Stuttgart)	Greeting words	10		
	11:50-12:10	Prof. Sidney Cohen (Weizmaninstitute of Science, Rehovot)	Talk (online)	20	Deciphering Electrochemical Processes Occurring Under a Graphene Membrane	online
	12:10-12:30	Prof. Bene Poelsema (University of Twente, Enschede)	Talk (online)	20	Shining new light on the motion of eutectic droplets across surfaces: a PEEM study of PtGe on Ge(110)	online
	12:30-14:00		Lunch buffet	90		
Session III 14:00-15:20	14:00-14:20	Prof. Wolf Widdra (University of Halle-Wittenberg)	Talk	20	Oxidic Quasicrystals: What do we learn from Scanning Probe Microscopy?	
	14:20-14:40	Dr. Gregor Hlawacek (Helmholtz-Zentrum- Dresden-Rossendorf)	Talk	20	New Imaging Modalities in Helium Ion Microscopy	
	14:40-15:00	Prof. Christian Ganser (National Institutes of Natural Sciences, Okazaki)	Talk (online)	20	Studying the motor protein kinesin with high-speed atomic force microscopy	online
	15:00-15:20	Prof. Robert Schennach/Dr. Caterina Cibula (Graz University of Technology)	Talk	20	AFM as a universal tool in paper research	
	15:20-16:00		Break	30		
Session IV 15:50-17:30	16:00-16:20	Dr. Aleksandar Matković	Talk	20	Naturally occurring magnetic 2D materials	
	16:20-16:40	Dr. Christian Hofer (HTL Leoben)/ Dr. Stefan Lorbek (Herta Reich Gymnasium Müzzzuschlag)	Talk	20	Science in School	
	16:40-17:00	Prof. Peter Hosemann (University of California, Berkley)	Talk (online)	20	Surface near Helium damage in materials studied with a high throughput implantation method	online
	17:00-17:10	Prof. Max Lagally (University of Wisconsin-Madison)	Greeting words (online)	10		online
	17:10-17:20	Philipp Münzer/Kevin Gradwohl (MUL)	Greeting words	10		
	17:20-17:30	Prof. Christian Teichert	Closing Remarks	10		

Tuesday September 21th 2021 (8:30-18:30)

(Second part of the symposium with contributions from current and former research collaboration partners of the SPM group Leoben)

	Time	Name	Event	length /minutes	Abstract	Remarks
Registration	7:00-8:30		Registration			Corona
Session I 8:30-10:00	8:30-8:45	Prof. Evgeniya Sheremet (Tomsk Polytechnic University)	Talk	15	Laser-Induced Advanced Materials for Flexible Electronics	
	8:45-9:00	Prof. Stefan Heun (NEST Pisa)	Talk (online)	15	Black Phosphorus n-type Doping by Cu: A Microscopic Surface Investigation	online
	9:00-9:15	Prof. Juan Jose de Miguel (University of Madrid)	Talk	15	Enantioselective Adsorption on Solid Surfaces	
	9:15-9:30	Prof. Aleksandra B. Djurišić (University of Hong Kong)	Talk (online)	15	Surface Functionalization of Metal Oxides for Hybrid Organic-Inorganic Lead Halide Perovskite Optoelectronics	
	9:30-10:00	Poster Advertisments		30		
	10:00-10:30	Poster Session + Break	Break & Posters	30		
Session II 10:30-12:00	10:30-10:45	Prof. Ana Silva (University of Lisbon)	Talk	15	Controlled Growth of High Current Functional Semiconductor Systems	
	10:45-11:00	Prof. Franciszek Krok (Jagiellonian University Krakow)	Talk	15	Tuning the Structural and Electronic Properties of TiO₂(110) Surface via Repeated Sputtering and Annealing	
	11:00-11:15	Prof. Olivier Siri (Aix Marseille University, CiNAM)	Talk	15	Metallo-oligomers synthesis: from solution to surface	
	11:15-11:30	Prof. Egbert Zojer (Graz University of Technology)	Talk	15	Are Organic Framework Materials the Better "Organic Semiconductors"?	



	11:30-11:45	Dr. Jan Cechal (Brno University of Technology)	Talk	15	Real-time view on deprotonation induced phase transitions of self-assembled 4,4'-biphenyl dicarboxylic acid on Ag(001) surfaces	
	11:45-12:00	Dr. Egon Pavlica (University of Nova Gorica)	Talk	15	Study of the Role of the Interface between Organic Semiconductors and Graphene on the Charge Transport	
	12:00-13:00		Lunch break	60		
Session III 13:00-14:30	13:00-13:15	Prof. W. Kern/ Prof. T. Griebler (MUL)	Talk	15	Investigating Molecular Transformations at the Nanometer Scale Using Friction Force Microscopy	
	13:15-13:30	Prof. Vessela Tsakova (Bulgarian Academy of Sciences)	Talk (online)	15	Carbon electrodes-supported Pd nanocatalysts obtained through electroless metal deposition	online
	13:30-13:45	Prof. Wolfgang Skorupa (Helmholtz-Zentrum-Dresden-Rossendorf)	Talk (online)	15	Subsecond Thermal Processing Using Flash Lamps for the Nanoscale and Beyond	online
	13:45-14:00	Prof. Marko Kralj (University of Zagreb)	Talk	15	Atomically Thin Multilayer Architectures for Plasmonics	
	14:00-14:15	Prof. Georgeta Salvan (TU Chemnitz)	Talk (online)	15	Magneto-optical spectroscopy applied to organic/inorganic heterostructures	online
	14:15-14:30	Dr. Borislav Vasić (IPB, University of Belgrade)	Talk (online)	15	Nano-Friction of Two-Dimensional Materials Studied by Atomic Force Microscopy	online
	14:30-15:00	Poster Session + Break	Break & Posters	30		
Session IV 15:00-16:30	15:00-15:15	Dr. Andreas Nevosad (AC2T Research GmbH, Wiener Neustadt)	Talk	15	Tribological and Nanoscopic Investigation of Manganese Phosphate Conversion Coatings	



	15:15-15:30	Dr. Bernhard Bayer-Skoff (Vienna University of Technology)	Talk	15	Anchoring of Single Indium Atoms and Few-Atom Indium Clusters onto Graphene via Silicon Heteroatoms	
	15:30-15:45	Dr. Igor Beinik (MAX IV Lund University)	Talk (online)	15	Soft X-ray Scanning Transmission Microscopy End-station at MAX IV	online
	15:45-16:00	Dr. Stephan Abermann (AIT Vienna)	Talk	15	Energy Conversion & Hydrogen	
	16:00-16:15	Prof. Peter Supancic (MUL)	Talk	15	Microscale Investigations on Double Schottky Barriers - the key elements of varistors	
	16:15-16:30	Prof. Edith Bucher (MUL)	Talk	15	Long-term stability of electrochemical solid oxide cells: The role of cation segregation, contaminants and surface reconstruction	
	16:30-17:00	Poster Session + Break	Break & Posters			
Session V 17:00-18:30	17:00-17:15	Dr. Oleg P. Dimitriev (NASU Kiev)	Talk (online)	15	Photoinduced Charge Transport in Films of Tricarbocyanine Dye Assisted by Nanoscale Disorder of Dye Aggregates	online
	17:15-17:30	Dr. Andrey Kadashchuk (EMEC Leuven/ NASU Kiev)	Talk (online)	15	Determination of the Density-of-States in OLED Host Materials using Thermally Stimulated Luminescence	online
	17:30-18:00	Lab Visits	Lab Visits			

POSTER SESSION

Nr.	Presenter	Abstract
P1	Stefan Wurster (ESI AAS)	Magnetoresistive and Magnetostrictive Properties of Nanocrystalline, Severe Plastically Deformed Materials
P2	Lukas Weissitsch (ESI AAS)	Severe Plastic Deformation as an Innovative Method to Enhance Magnetic Properties in Bulk Materials
P3	Iva Šrut Rakić (Institut of Physics, Zagreb)	Local, Intercalation Driven, Merging and Work Function Change of Epitaxial MoS₂ Grown on Graphene/Ir(111)
P4	Wojciech Belza (Jagiellonian University Krakow)	N-substituted pentacene's derivative thin film growth on TiO₂(110): morphology and electronic properties



Novel hBN/In(Ga)Te Heterostructures For Wide Spectrum Light Absorbers

Andrijana Solajic and Jelena Pesic

Institute of Physics Belgrade, University of Belgrade, Serbia

yelena@ipb.ac.rs

In recent years, enormous attention given to the exploration and researching of two-dimensional materials has started a whole new era in materials science and countless possibilities for novel devices emerged. Two dimensional group III monochalcogenides have recently attracted quite attention for their wide spectrum of optical and electric properties, being promising candidates for optoelectronic and novel electrical applications¹. However major obstacle in using them in various application arises from the fact they are strongly sensitive and vulnerable to oxygen in air in their pristine form, especially as thin films or single layer. Many studies reveal that monolayers are oxidized fast, almost instantly, after exposure to the air^{2,3}. Here we present two newly designed vdW heterostructures based on hBN (hexagonal boron nitride) and GaTe or InTe monolayer, in order to make them more robust and resistant to mechanical influences while enhancing their optoelectronic properties. Using density functional theory we investigate electronic and optical properties of those heterostructures. Our study reveals them as an excellent candidates for various optoelectronic devices with great capabilities of absorption from visible light to far UV part of spectrum, being exceptionally good for absorbing the UV light. The hBN layer is beneficial⁴ for mechanical protection of sensitive and vulnerable single layers of monochalcogenides like InTe and GaTe, while as we showed, in our heterostructures, electronic and optical properties are not only preserved but even enhanced. Importantly, we demonstrate type of stacking does not affect properties of the heterostructure, making them convenient for experimental realization.

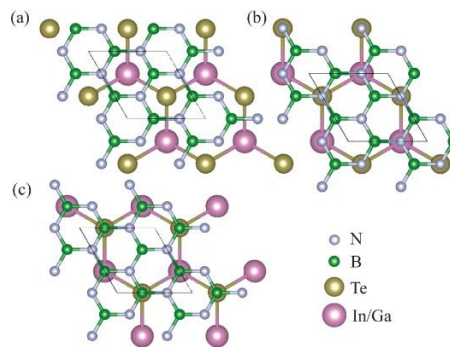


FIG 1. hBN/In(Ga)Te heterostructures. Top view of three possible stacking types, (a) H-top, (b) N-top and (c) B-top

[1] C. Ren, S. Wang, H. Tian, Y. Luo, J. Yu, Y. Xu, and M. Sun, First principles investigation on electronic properties and band alignment of group III monochalcogenides, *Scientific reports* 9, 1 (2019)

[2] M. Rahaman, R. D. Rodriguez, M. Monecke, S. A. Lopez-Rivera, and D. R. T. Zahn, GaSe oxidation in air: from bulk to monolayers, *Semiconductor Science and Technology* 32, 105004 (2017).

[3] Y. Guo, S. Zhou, and J. Zhao, Oxidation behaviors of two-dimensional metal chalcogenides, *ChemNanoMat* 6, 838 (2020).

[4] D. A. Bandurin, A. V. Tyurnina, L. Y. Geliang, A. Mishchenko, V. Zo'lyomi, S. V. Morozov, R. K. Kumar, R. V. Gorbachev, Z. R. Kudrynskiy, S. Pezzini, et al., High electron mobility, quantum hall effect and anomalous optical response in atomically thin InSe, *Nature nanotechnology* 12, 223 (2017)



PHEMTRONICS SCHOOL PROGRAM

July 17, SUNDAY: FUNDAMENTAL CONCEPTS

08:00-8:15 Registration and Opening: PHEMTRONICS SCHOOL

08:15-10:00 O. Muskens -*Fundamentals of Plasmonics*

10:00-10:30 Coffee break

10:30-12:15 T. Taubner -*Introduction and Optical Properties of PCMs: from THz to VIS*

12:15-14:00 D. Wright -*Coupling with PCM*

Lunch

15:30-17:15 J. Pestic -*Density functional theory calculations for PCM: basic concepts and applications*

17:15-17:45 Coffee break

17:45-19:30 K. Hingerl -*Phase Transition in PCMs: Basic thermodynamic concepts*

July 18, MONDAY: APPLICATIONS/INDUSTRIAL&COMPANY VIEWS

08:30-10:15 M. Wuttig -*Chemistry of PCMs: Bonds and design of PCM*

10:15-10:45 Coffee break

10:45-12:30 W. Pernice -*PCM Engineering: Computing and Neuromorphic networks*

12:30-14:15 H. Bhaskaran -*Perspective of PCM applications: A company vision*

Concluding remarks

Lunch

PLACE: *Palacio de Congresos de Torremolinos (<https://palacio-congresos.es/en/home-2/>), Sala Manantiales (Manantiales room, <https://palacio-congresos.es/en/manantiales-room/>).*

NOTE: *Each lecture is composed of two parts with a break of 15 minutes.*



Mauterndorf 2020

21st International Winterschool
New Developments in Solid State Physics

Program

23-28 February 2020

JKU
JOHANNES KEPLER
UNIVERSITY LINZ

M
MONTAN
UNIVERSITÄT
WWW.UNILEOBEN.AC.AT

Castle of Mauterndorf
A-5570 Mauterndorf
Province of Salzburg, Austria
www.jku.at/hfp/mauterndorf
winterschool@jku.at

- V-10 Jonas Kiemle, Walter Schottky Institut, TU München**
In-plane anisotropy of the photon-helicity induced linear Hall effect in few-layer WTe_2
- V-11 Florian Sigger, Walter Schottky Institut, TU München**
Hybridized indirect excitons in MoS_2/WS_2 heterobilayers
- V-12 Lanqing Zhou, Forschungszentrum Jülich**
Manipulating transition-metal dichalcogenide monolayers with proximity effects
- V-13 Minh Bui, Forschungszentrum Jülich**
Optical characterization of ion implanted monolayer transitional metal dichalcogenides
- V-14 Tobias M. Petzak, Universität Augsburg**
2D Semiconductors in moving and standing phonon fields
- V-15 Soma Adhikari, Johannes Kepler Universität Linz**
Semimetallic van der Waals layered materials – a workbench for quantum physics
- V-16 Christoph Kastl, Walter Schottky Institut, TU München**
Atomistic fabrication and understanding of defects in 2D materials
- V-17 Ian Correa Sampaio, Universität Basel**
Towards gate defined nanostructures in TMDCs
- V-18 Elena Blundo, Sapienza University of Roma, Italy**
Controllable micro/nano-dome creation in proton-irradiated bulk transition-metal dichalcogenides
- V-19 Lukas Mennel, TU Vienna, Institute of Photonics**
Band nesting in two-dimensional materials: an exceptionally sensitive probe of strain
- V-20 Alexander Hötger, Walter Schottky Institut, TU München**
Gate-dependent switching of localized quantum emitters in MoS_2
- V-21 Malte Kremser, Walter Schottky Institut, TU München**
Discrete Interactions between Trapped Interlayer Excitons at a MoSe_2 - WSe_2 Heterointerface
- V-22 Jelena Pešić, University of Belgrade, Serbia**
Strain effects on vibrational properties in hexagonal 2D materials from the first principles – doped graphene and MgB_y monolayer
- V-23 Zhengming Wu, SwissLitho AG, Zurich, CH**
Contacts to 2D materials with vanishing Schottky barriers by NanoFrazor lithography
- V-24 Ali Elshaari, KTH Stockholm**
Wafer scale two-dimensional devices for quantum optoelectronics
- V-25 Hermann Detz, CEITEC Brno, Czech Republic**
Modeling of Interface Morphologies in Superlattice Structures
- V-26 Jonathan Ludwig, University of Leuven, Belgium**
Investigations on layered MoS_2 structures by means of scanning probe microscopy

Strain effects on vibrational properties in hexagonal 2D materials from the first principles – doped graphene and MgB₂- monolayer

Jelena Pešić and Andrijana Šolajić

*Center for Solid State Physics and New Materials,
Institute of Physics Belgrade, University of Belgrade, Serbia*

Abstract. We present computational study within the density functional theory framework of the effects of application of the (equi) biaxial strain on the two isostructural two-dimensional materials, Li-intercalated graphene and magnesium-diboride monolayer, both electron-phonon mediated superconductors [1-4]. The application of the tensile biaxial strain causes softening of the phonons, enhancing the total electron-phonon interaction and resulting in significantly a higher critical temperature. By application of the strain, we achieve the increase of the density of states at the Fermi level and softening of the modes [2,4,5]. Without drastically modifying the structure, with experimentally achievable strain [2,5], we significantly affect the electron-phonon coupling strength. We showed that critical temperature of the superconducting state can be enhanced up to several times by the application of strain in order to modify the electron-phonon coupling.

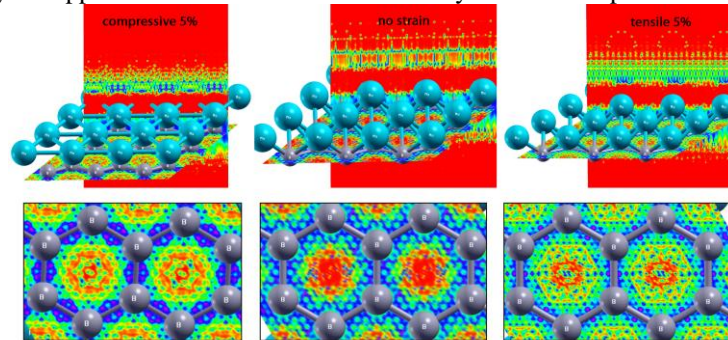


FIGURE 1. Electron localization function (ELF) for MgB₂-mono nonstrained and compressively (left) and tensely (right) strained. Top: 3D projection of ELF with focus on the Mg layer. Bottom: ELF projection on the B layer.

REFERENCES

1. G. Profeta, M. Calandra, F. Mauri, *Nature Physics* **8**, 131–134 (2012).
2. J. Pešić, R. Gajić, K. Hingerl, M. Belić, *Europhysics Letters*, **108** (6), 67005, (2014)
3. J. Bekaert, A. Aperis, B. Partoens, P.M. Oppeneer, M.V. Milošević, *Physical Review B* **96** (9), 094510, (2017)
4. J. Pešić, I Popov, A. Šolajić, V. Damljanić, K. Hingerl, M. Belić, R. Gajić, *Condensed Matter* **4** (2), 37 (2019)
5. V. Čelebonović, J. Pešić, R. Gajić, B. Vasić, A. Matković, *Journal of Applied Physics* **125** (15), 154301 (2019)



22nd International Winterschool

New Developments in Solid State Physics

Abstract Book

12-17 February 2023

JKU
JOHANNES KEPLER
UNIVERSITÄT LINZ

M
MONTAN
UNIVERSITÄT
WWW.UNILEOBEN.AC.AT

Castle of Mauterndorf
A-5570 Mauterndorf
Province of Salzburg, Austria
www.jku.at/mauterndorf
email: winterschool@jku.at

- P2.22 Amine Ben Mhenni, WSI TU München**
Influence of the Dielectric Environment on Excitons in Atomically-thin Transition Metal Dichalcogenides
- P2.23 Mirco Troue, WSI TU München**
Coherence of dense interlayer exciton ensembles in MoSe₂/WSe₂ heterobilayers
- P2.24 Pedro Soubelet, WSI TU München**
Strain control of exciton and trion valley polarization in monolayer transition metal dichalcogenides
- P2.25 Chenjiang Qian, WSI TU München**
Emitter-Optomechanical Interaction in Ultra-High-Q hBN Nanocavities
- P2.26 Michele Bissolo, WSI TU München**
Electrically active deep-level defects in transition metal dichalcogenides
- P2.27 Lars Thole, Universität Hannover**
Long Persistent Photoconductivity in Thin Films of ZrS_y
- P2.28 Michele Masseroni, ETH Zürich**
Toward single-carrier operations in transition-metal dichalcogenide quantum dots
- P2.29 Andreas V. Stier, WSI TU München**
Proximity-enhanced valley Zeeman splitting at the WS₂/graphene interface
- P2.30 Max Ruckriegel, ETH Zürich**
Progress on hybrid cQED with Graphene Quantum Dots
- P2.31 Jonas Lara, Gerber Ostertag, ETH Zürich**
Proximity-induced spin-orbit coupling and bandgap engineering in graphene/transition-metal dichalcogenide heterostructures
- P2.32 Lina Bockhorn, Universität Hannover**
Topological Phenomena in Magnetotransport of Self Assembled Folded Graphene
- P2.33 Tomáš Fridrišek, Charles University Prague**
Effect of substrate and passivation on the transport properties of epitaxial graphene
- P2.34 Max Hofinger, JKU Linz**
Electronic transport in 2D NiPS₃ on graphene
- P2.35 Jonas Kiemle, WSI TU München**
Spin-orbit control in graphene-based van der Waals interfaces
- P2.36 Bei Zheng, Universität Hannover**
Temperature-dependent Transport Measurements on Twisted Graphene Heterostructures around Magic Angle
- P2.37 Katarzyna Posmyk, Wroclaw University**
Exciton Fine Structure in Two-Dimensional Perovskites
- P2.38 Michał Baranowski, Wroclaw University**
Charge and Energy Transfer in TMD/2D Perovskites Heterostructures
- P2.39 Michael Kempf, Universität Rostock**
Optical probing of spin polarization dynamics in 2D (BA)MAPI perovskite
- P2.40 Philipp Moser, WSI TU München**
Rashba excitons in the 2D Ruddlesden-Popper perovskite (BA)MAPI

Transport properties of NiPS₃ on graphene

M. Hofinger^{1*}, J. Pešić², K. Burgholzer¹, J. Salchegger¹, R. Adhikari¹, M. Bockstedte¹, A. Bonanni¹

¹*Institute of Semiconductor Physics, Johannes Kepler University Linz, Altenbergerstr. 69, A-4040 Linz, Austria*

²*Center for Solid State Physics and New Materials, Institute of Physics Belgrade, University of Belgrade, Pregrevica 118, 11000 Belgrade, Serbia*

Two dimensional (2D) materials hold significant potential for electronic applications of all kinds. Specifically, compounds belonging to the MPS₃ family ($M = \text{Mn, Fe, Co, Ni}$) show electronic and magnetic properties relevant for applications in (nano-)electronics [1]. In particular, NiPS₃ with few layers (FL) is an antiferromagnetic semiconductor whose capabilities as a heterostructure component have yet to be well studied. Graphene, in turn, is a 2D material with outstanding carrier mobility, thermal conductivity, mechanical strength and low layer thickness, meaning it holds vast potential for future advanced electronic applications [3].

Here, FL NiPS₃ and monolayer graphene are manufactured with mechanical exfoliation and dry transfer in order to produce heterostructures on SiO₂/Si substrates with a varying layer count of NiPS₃. Exfoliation and layer quality are optimized for both materials separately, before the heterostructures are assembled. Graphene is placed on the contacted substrates and the NiPS₃ layer is put on top of the graphene. The sample materials are thoroughly examined and characterized via optical microscopy, Raman spectroscopy [2] and Atomic Force Microscopy (AFM) measurements prior to heterostructure assembly and afterwards. The electronic structure and transport properties are simulated from first principles using Vienna *Ab Initio* Simulations Package (VASP) [1] as part of a cooperation with Jelena Pešić from the University of Belgrade – varying layer thickness and the influence of strain on the electronic structure are examined.

Unmodified graphene is unsuited for most electronic applications, due to the zero-width bandgap. The electronic structure needs to be modified in a heterostructure to be useful. Combining graphene with an antiferromagnetic semiconductor may yield characteristics useful for future cutting-edge electronics.

We aim to explore the transport properties of the heterostructure depending on the layer thickness of NiPS₃ and compare with the results of the *ab initio* calculations.

- [1] Lane, Christopher & Zhu, Jian-Xin. (2020). Thickness dependence of electronic structure and optical properties of a correlated van der Waals antiferromagnet NiPS₃ thin film.
- [2] Kuo, CT., Neumann, M., Balamurugan, K. et al. Exfoliation and Raman Spectroscopic Fingerprint of Few-Layer NiPS₃ Van der Waals Crystals. *Sci Rep* 6, 20904 (2016)
- [3] Y. Wu, D. B. Farmer, F. Xia and P. Avouris, "Graphene Electronics: Materials, Devices, and Circuits," in *Proceedings of the IEEE*, vol. 101, no. 7, pp. 1620-1637, July 2013

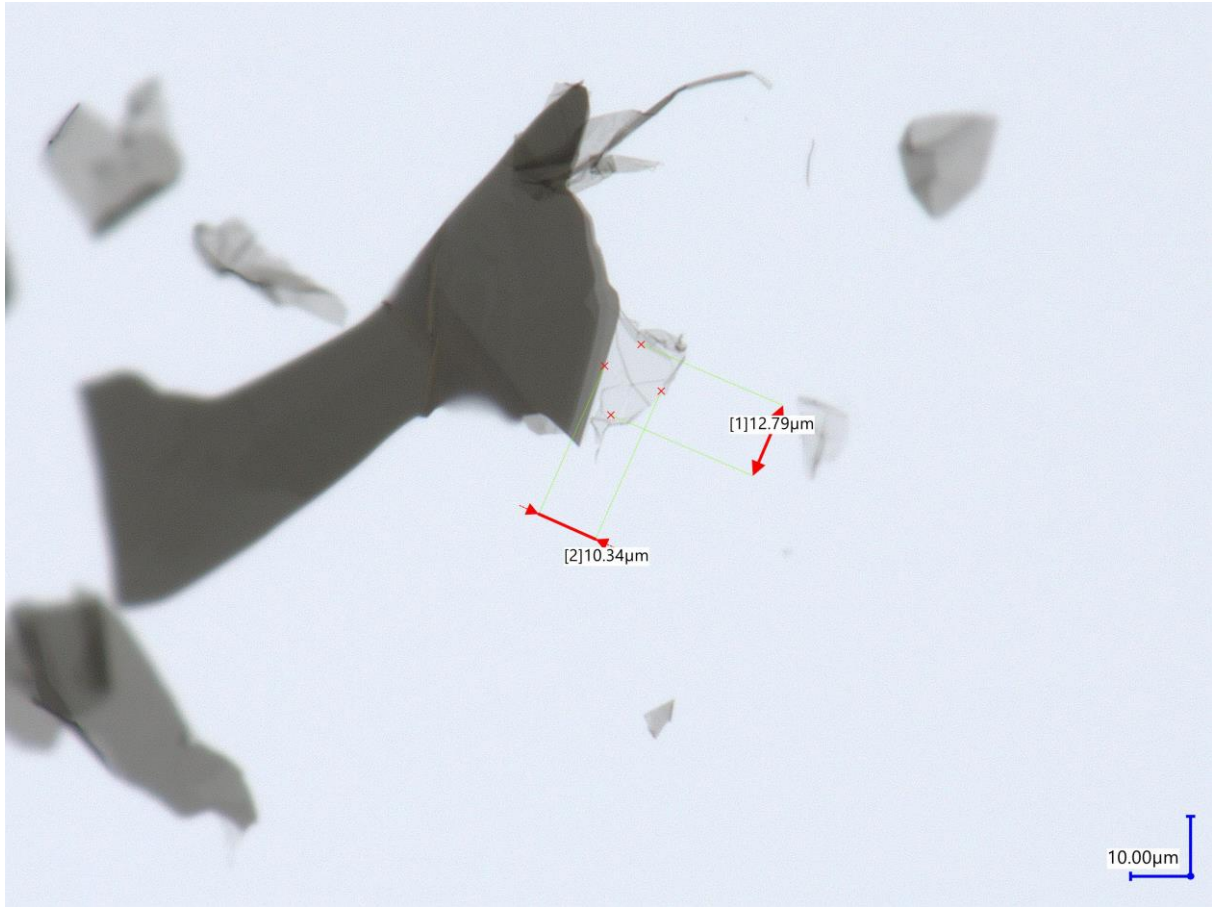
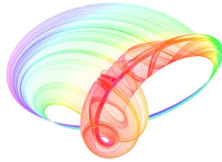


Fig. 1: First exfoliated graphene monolayer

Book of abstracts



PHOTONICA2019

The Seventh International School and Conference on
Photonics, 26 August – 30 August 2019, Belgrade, Serbia

& Machine Learning with Photonics Symposium
(ML-Photonica 2019)



& ESUO Regional Workshop



& COST action CA16221



Editors: Milica Matijević, Marko Krstić and Petra Beličev

Belgrade, 2019

ABSTRACTS OF TUTORIAL, KEYNOTE, INVITED LECTURES,
PROGRESS REPORTS AND CONTRIBUTED PAPERS

of

The Seventh International School and Conference on Photonics
PHOTONICA2019, 26 August – 30 August 2019, Belgrade, Serbia

and

Machine Learning with Photonics Symposium

and

ESUO Regional Workshop

Editors

Milica Matijević, Marko Krstić and Petra Beličev

Technical Assistance

Danka Stojanović and Goran Gligorić

Publisher

Vinča Institute of Nuclear Sciences

Mike Petrovića Alasa 12-14, P.O. Box 522

11000 Belgrade, Serbia

Printed by

Serbian Academy of Sciences and Arts

Number of copies

300

ISBN 978-86-7306-153-5

OM.5 Sol-gel tantalum pentoxide thin films with tunable refractive index for optical sensing applications	103
<i>R. Georgiev, B. Georgieva, K. Lazarova, M. Vasileva, T. Babeva</i>	
OM.6 Macroporous silicon photonic crystals for gas sensing purposes	104
<i>D. Cardador, D. Segura, A. Rodríguez</i>	
OM.7 Optical and Structural Investigation of Cr ₂ O ₃ Thin Films: the Effect of Thickness on Their Applicability in Differential Photodetectors	105
<i>M. Gilić, J. Mitrić, S. Petrović, D. Perusko, J. Cirković, L. Reissig, N. Romčević</i>	
OM.8 Optical and mechanical properties and electron-phonon interaction in graphene doped with metal atoms.....	106
<i>A. Šolajić, J. Pešić, R. Gajić</i>	
OM.9 The influence of nanosheet size on formation of graphene films by Langmuir-Blodgett deposition from the liquid phase	107
<i>S. Andrić, T. Tomašević-Ilić, D. Vasiljević-Radović, M. Spasenović</i>	
OM.10 Structural properties of Eu ³⁺ doped YVO ₄ : Far – infrared spectroscopy.....	108
<i>J. Mitrić, N. Paunović, J. Čirković, M. Gilić, M. Romčević, N. Romčević</i>	
OM.11 Tunable quantum phase transitions in asymmetric HgTe/Cd _x Hg _{1-x} Te double quantum wells	109
<i>D. B. Topalović, V. V. Arsoski, M. Ž. Tadić, F. M. Peeters</i>	
OM.12 “Point-by-point” inversion vs. parametrized fitting of ultrathin film’s dielectric function measured by rotating polarizer ellipsometry	110
<i>M. M. Jakovljević, S. Aškerabić, M. Artemyev, A. V. Prudnikau, A. V. Antanovich, G. Isić, B. Vasić, U. Ralević, Z. Dohčević-Mitrović, R. Gajić</i>	
OM.13 Influence of In ⁺ ions implantation in GaAs and Si on their optical characteristics	111
<i>O. Stepanović, M. Popović, M. Novaković, M. Nenadović, J. Potočnik, Z. Rakočević</i>	
OM.14 Wavelength Converter Materials for Photovoltaics Containing Rare-Earth Ions	112
<i>M. Sendova-Vassileva</i>	
OM.15 Negative thermal expansion of pullulan multilayers	113
<i>S. Savic-Sević, D. Pantelić, B. Murić, D. Vasiljević, B. Kolaric, B. Jelenković</i>	
OM.16 Large-scale deposition of self-assembled thin films from liquid phase exfoliated h-BN	114
<i>T. Tomašević-Ilić, Đ. Jovanović, R. Panajotović, R. Gajić, M. Spasenović</i>	
OM.17 Atomic layer deposited Al-doped ZnO for flexible optoelectronics	115
<i>D. Z. Dimitrov, V. Marinova, S. H. Wang, B. Blagoev, S. H. Lin, J. Y. Juang</i>	
OM.18 Analytical model of amplification in strained Ge	116
<i>E. E. Orlova, R. W. Kelsall</i>	

Optical and mechanical properties and electron-phonon interaction in graphene doped with metal atoms

A. Šolajić¹, J. Pešić¹ and R. Gajić¹

¹*Institute of Physics Belgrade, University of Belgrade, Pregrevica 118, 11080 Belgrade, Serbia*
e-mail: solajic@ipb.ac.rs

Graphene, the first experimentally realized 2D material with outstanding mechanical and electrical properties as well an excellent optical transparency [1, 2, 3], is predicted to have many applications in various scientific fields [4, 5]. Furthermore, there are numerous ways for modifications of pure graphene that allow precise tuning of its properties or observation of some new effects, including the applied strain, various types of controlled defects, exposure to electrical or magnetic field, or doping. It is known that graphene with alkali metal atoms adsorbed on its surface becomes superconducting with critical temperatures up to 11K [6, 7, 8].

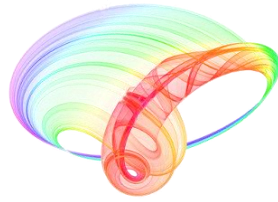
The question remains what happens with optical and mechanical properties of such structures, can we preserve or enhance these superb properties while making graphene superconducting at the same time.

Here we investigate structures based on graphene doped with several metal atoms. Using the Density Functional Theory, we analyze the optical and elastic properties of those structures and calculate the electron-phonon interaction. We discuss the influence of adsorbed atoms on these properties.

REFERENCES

- [1] M. Katsnelson, K. S. Novoselov, A. K. Geim, *Nat. Phys.* 2, 620 (2006).
- [2] K. I. Bolotin et al., *Solid State Commun.* 146, 351 (2008).
- [3] C. Lee et al., *Science* 321, 385 (2008).
- [4] A. C. Ferrari et al., *Nanoscale* 7, 4598 (2015).
- [5] D. Todorović et al., *2D Mater.* 2, 045013 (2015).
- [6] G. Profeta, M. Calandra, F. Mauri, *Nat. Phys.* 8, 131 (2012).
- [7] J. Pešić et al., *EPL* 108, 67005 (2014).
- [8] A. P. Durajski, K. M. Skoczylas, R. Szczyński, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 21, 5925 (2019).

Book of abstracts



PHOTONICA2021

VIII International School and Conference on Photonics

& HEMMAGINERO workshop

23 - 27 August 2021,

Belgrade, Serbia

Editors

Mihailo Rabasović, Marina Lekić and Aleksandar Krmpot

Institute of Physics Belgrade, Serbia

Belgrade, 2021

ABSTRACTS OF TUTORIAL, KEYNOTE, INVITED LECTURES,
PROGRESS REPORTS AND CONTRIBUTED PAPERS

of

VIII International School and Conference on Photonics
PHOTONICA2021

23 - 27 August 2021

Belgrade Serbia

Editors

Mihailo Rabasović, Marina Lekić and Aleksandar Krmpot

Publisher

Institute of Physics Belgrade

Pregrevica 118

11080 Belgrade, Serbia

Printed by

Serbian Academy of Sciences and Arts

Number of copies

200

ISBN 978-86-82441-53-3

CIP - Каталогизacija у публикацији - Народна библиотека Србије, Београд

535(048)

621.37/.39:535(048)

621.37/.39:535]:61(048)

66.017/.018(048)

INTERNATIONAL School and Conference on Photonic (8; 2021; Beograd)

Book of abstracts / VIII International School and Conference on Photonics PHOTONICA2021 & HEMMAGINERO workshop, 23 - 27 August 2021, Belgrade, Serbia; editors Mihailo Rabasović, Marina Lekić and Aleksandar Krmpot. - Belgrade: Institute of Physics, 2021 (Belgrade: SASA). - V, 192 str.: ilustr.; 30 cm

Tiraž 200. - Bibliografija uz većinu apstrakata. - Registar.

ISBN 978-86-82441-53-3

1. Hemmaginero Workshop (2021; Beograd)

а) Оптика -- Апстракти б) Оптички материјали -- Апстракти в) Оптоелектроника -- Апстракти г) Оптоелектроника -- Биомедицина -- Апстракти д) Телекомуникације -- Апстракти

COBISS.SR-ID 44290057

Structural and Optical Characterization of titanium-carbide and polymethyl methacrylate based nanocomposite

J. Pešić¹, A. Šolajić¹, J. Mitrić¹, M. Gilić¹, I. Pešić², N. Paunović¹, N. Romčević¹

¹*Institute of Physics Belgrade, University of Belgrade,
Pregrevica 118, 11080 Belgrade, Serbia;*

²*Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade,
11000 Belgrade, Serbia*

e-mail: yelena@ipb.ac.rs

The rich chemistries and unique morphologies of titanium carbide MXenes made them strong candidates for many applications like sensors and electronic device materials [1]. They can potentially be used as additives to polymers to fabricate composites with outstanding mechanical properties and good electrical conductivities. Presence of titanium-dioxide as a residue of MXene chemical synthesis is researched for its potential benefit on electrochemical properties [2].

In this study we present structural and optical characterization of such polymer nanocomposite titaniumcarbide/PMMA (Polymethyl methacrylate) consisting of Ti_3C_2 , TiC_2 MXenes and TiC , and TiO_2 residues of synthesis in PMMA matrix, as a multicomponent nanocomposite.

Using XRD, SEM, infrared and Raman spectroscopy, followed by comparative study on the vibrational properties using density functional theory calculations we characterize this nanocomposite.

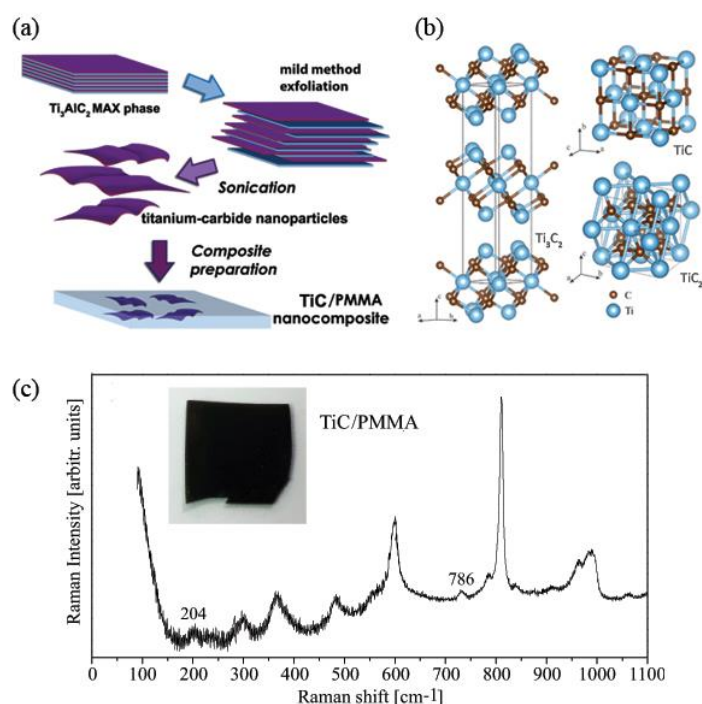


Figure 1. a) Schematic describing the synthesis process and preparation of composite starting from the Ti_3AlC_2 MAX phase b) Schematic representation of titanium-carbide structures present at the composite c) Raman spectrum of $TiC/PMMA$ nanocomposite with titanium-carbide related peaks marked. Inset: photo of the sample.

REFERENCES

- [1] Naguib, M.; Kurtoglu, M.; Presser, V.; Lu, J.; Niu, J.; Heon, M.; Hultman, L.; Gogotsi, Y.; Barsoum, M.W., *Advanced Materials* 2011, 23, 4248–4253.
- [2] Zhu, J.; Tang, Y.; Yang, C.; Wang, F.; Cao, M., *Journal of The Electrochemical Society* 2016, 163, A785–A791.



9-10 June 2022, Institute of Physics Belgrade

<http://strainedfesc.ipb.ac.rs/workshop-in-strongly-correlated-electron-systems/>

WORKSHOP IN STRONGLY CORRELATED ELECTRON SYSTEMS

Special focus of the conference will be devoted to Iron-chalcogenide superconductors and research performed during StrainedFeSC project.

"Workshop in strongly correlated electron systems" will be held in honor of Academician Zoran V. Popovic.

This workshop is supported by the Science Fund of the Republic of Serbia under the grant number 6062656 at Institute of Physics Belgrade Serbia.



Organization Committee

Dr. Nenad Lazarević, *Institute of Physics Belgrade, University of Belgrade*

Dr. Jelena Pešić, *Institute of Physics Belgrade, University of Belgrade*

Dr. Borislav Vasić, *Institute of Physics Belgrade, University of Belgrade*

Dr. Ana Milosavljević, *Institute of Physics Belgrade, University of Belgrade*

Dr. Sanja Đurđić Mijin, *Institute of Physics Belgrade, University of Belgrade*

MSc Andrijana Šolajić, *Institute of Physics Belgrade, University of Belgrade*

SUPPORTED BY



Фонд за науку
Републике Србије



Center for Solid
State Physics &
New Materials

CONFERENCE PROGRAMME

Thursday, June 9, 2022

10⁰⁰ – 10³⁰ Welcome speech by the director of Institute of Physics Dr. Aleksandar Bogojević

10³⁰ – 11⁰⁰ Honorary speech, Zoran V. Popović, *Serbian Academy of Sciences and Arts, Belgrade, Serbia*

11⁰⁰ – 11³⁰ **Raman scattering study of the FeSe_{1-x}S_x**, Nenad Lazarević, *Institute of Physics Belgrade, University of Belgrade, Belgrade, Serbia*

11³⁰ – 12⁰⁰ **Light scattering in Fe pnictides and chalcogenides**, Rudi Hackl, *IFW Dresden, Dresden, Germany*

12⁰⁰ – 12³⁰ **Spin-lattice correlations at elevated temperatures in EuTiO₃**, Efthymios Liarokapis, *Department of Physics, National Technical University of Athens, Greece*

LUNCH BREAK

14⁰⁰ – 14³⁰ **Symmetries of layered structures**, Božidar Nikolić, *NanoLab, Faculty of Physics, University of Belgrade, Belgrade, Serbia*

14³⁰ – 15⁰⁰ **Nanoscale resistive switching in iridates and manganites**, Borislav Vasić, *Center for Solid State Physics and New Materials, Institute of Physics Belgrade, Serbia*

15⁰⁰ – 15³⁰ **Interplay of anomalous Hall angle and magnetic anisotropy in ferromagnetic topological crystalline insulator thin films**, Rajdeep Adhikari, *Institut für Halbleiter-und-Festkörperphysik, Johannes Kepler University, Linz, Austria*

15³⁰ – 16⁰⁰ **First Principle study of Evolution of Vibrational Modes of FeSe Under Uniaxial Strain**, Jelena Pešić, *Center for Solid State Physics and New Materials, Institute of Physics Belgrade, Serbia*

16⁰⁰ – 16³⁰ **Steps towards ab-initio predictions of electron mobility in materials with strong electron-phonon interaction**, Nenad Vukmirović, *Institute of Physics Belgrade, University of Belgrade, Belgrade, Serbia*

COFFEE BREAK

16⁴⁵ – 17¹⁵ **Infrared and Raman Study in narrow gap semiconductor FeGa₃**, Darko Tanasković, *Institute of Physics University of Belgrade, Belgrade, Serbia*

17¹⁵ – 17⁴⁵ **Effective Medium Theory in Maxwell Garnett Approximation for Structural and Optical Characterization of some Chalcogenide – based Semiconducting Nanomaterials**, Jelena Mitrić, *Institute of Physics University of Belgrade, Belgrade, Serbia*

17⁴⁵ – 18¹⁵ **Suppression of superconductivity and nematic order in FeSe_{1-x}S_x (0 ≤ x ≤ 1)**, Cedomir Petrovic, *Condensed Matter Physics and Materials Science Department, Brookhaven National Laboratory, Upton, USA*

WORKSHOP IN STRONGLY CORRELATED ELECTRON SYSTEMS
BELGRADE, JUNE 9 – 10, 2022

Friday, June 10, 2022

10⁰⁰ – 10³⁰ **A new family of Kitaev materials**, Qingming Zhang, *Lanzhou University, Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Lanzhou, Gansu, China*

10³⁰ – 11⁰⁰ **Complex oxide heterostructures for efficient spin to charge conversion**, Alberto Pomar, *Instituto de Ciencia de Materiales de Barcelona, Barcelona, Spain*

11⁰⁰ – 11³⁰ **DFT+ Σ 2 method for electron correlation effects at transition metal surfaces and nano-devices**, Miloš Radonjić, *Institute of Physics Belgrade, University of Belgrade, Belgrade, Serbia*

COFFEE BREAK

11⁴⁵ – 12¹⁵ **Dynamic tuning of quantum light emission from GaN/InGaN nanowire quantum dots by surface acoustic waves**, Snežana Lazić, *Departamento de Física de Materiales, Instituto 'Nicolás Cabrera' and Instituto de Física de Materia Condensada (IFIMAC), Universidad Autónoma de Madrid, Madrid, Spain*

12¹⁵ – 12⁴⁵ **First-principles exploration of superconducting 2D materials for emerging quantum technologies**, Jonas Bekaert, *Condensed Matter Theory (CMT), Department of Physics & NANOLab Center of Excellence, University of Antwerp, Antwerp, Belgium*

12⁴⁵ – 13¹⁵ **The electric field gradient at ⁵⁷Fe in Fe_{1- δ} Te₂**, Valentin N. Ivanovski, *Department of Nuclear and Plasma Physics, Vinca Institute of Nuclear Sciences, National Institute of the Republic of Serbia, University of Belgrade, Belgrade, Serbia*

LUNCH BREAK

15⁰⁰ – 15³⁰ **Nonlinear and dynamic behaviour of exciton-polariton coupling processes in WS₂ nanostructures**, Bojana Višić, *Institute of Physics Belgrade, University of Belgrade, Belgrade, Serbia, Solid State Physics Department, Jozef Stefan Institute, Ljubljana, Slovenia*

16⁰⁰ – 16³⁰ **Synthesis and characterization of ternary Van der Waals MoxWx-1S2 nanotubes for advanced field emission application**, Luka Pirker, *Condensed Matter Physics Department, Jozef Stefan Institute, Ljubljana, Slovenia, Department of Electrochemical Materials, J. Heyrovský Institute of Physical Chemistry, Praha, Czech Republic*

16³⁰ – 17⁰⁰ **Influence of magnetism and electron-phonon interaction on lattice dynamics of pure and Co-doped K_xFe_{2-y}Se₂ single crystals**, Marko Opačić, *Institute of Physics Belgrade, University of Belgrade, Belgrade, Serbia*

COFFEE BREAK

17¹⁵ – 17⁴⁵ **Suppression of inherent ferromagnetism in Pr-doped CeO₂ nanocrystal**, Novica Paunović, *Institute of Physics Belgrade, University of Belgrade, Belgrade, Serbia*

17⁴⁵ – 18¹⁵ **Fluctuating hexamer precursor to a two-stage electronic transition in RuP**, Emil Bozin, *Condensed Matter Physics and Materials Science Division, Brookhaven National Laboratory, Upton, USA*

18¹⁵ **Closing Ceremony**

Raman scattering study of the $\text{FeSe}_{1-x}\text{S}_x$

N. Lazarević¹, A. Baum^{2,3}, A. Milosavljević¹, L. Peis^{2,3}, R. Stumberger^{2,3}, J. Bekaert⁴, A. Solajić¹, J. Pešić¹, A. Wang⁵, M. Šćepanović¹, M. V. Milošević⁴, C. Petrović⁶, Z.V. Popović^{1,7} and R. Hackl^{2,3,8}

¹*Center for Solid State Physics and New Materials, Institute of Physics Belgrade, University of Belgrade, Pregrevica 118, 11080 Belgrade, Serbia*

²*Walther Meissner Institut, Bayerische Akademie der Wissenschaften, 85748 Garching, Germany*

³*Fakultät für Physik, Technische Universität München, 85478 Garching, Germany*

⁴*Department of Physics, University of Antwerp, Groenenborgerlaan 171, B-2020 Antwerp, Belgium*

⁵*School of Physics, Chongqing University, Chongqing 400044, China*

⁶*Condensed Matter Physics and Materials Science Department, Brookhaven National Laboratory, Upton, NY 11973-5000, USA*

⁷*Serbian Academy of Sciences and Arts, Kneza Mihaila 35, 11000 Belgrade, Serbia*

⁸*IFW Dresden, Helmholtzstr. 20, 01069 Dresden, Germany*

A Raman scattering study of the entire substitution range of the $\text{FeSe}_{1-x}\text{S}_x$ solid solution is presented. Experimental data were obtained as a function of temperature, scattering symmetry and sulfur concentration x ($0 \leq x \leq 1$). All excitations - phonons, spins and charges are analyzed thoroughly. The energy and width of iron-related B_{1g} phonon mode vary continuously across the entire range of sulfur substitution, whereas the A_{1g} chalcogenide mode disappears above $x = 0.23$ and reappears at a much higher energy when $x = 0.69$. Similarly, the spectral features appearing at finite doping in A_{1g} symmetry vary discontinuously. The magnetic excitation centered at approximately 500 cm^{-1} disappears for $x = 0.23$ and above. The low-energy mode associated with fluctuations displays maximal intensity at the nemato-structural transition and thus tracks the phase boundary.

The work was supported by the Science Fund of the Republic of Serbia, PROMIS, No. 6062656, StrainedFeSC.

First Principle study of Evolution of Vibrational Modes of FeSe Under Uniaxial Strain

Jelena Pešić and Andrijana Šolajić

Center for Solid State Physics and New Materials, Institute of Physics Belgrade, Serbia

Application of strain is one of the effective ways to engineer the various properties of materials. Iron-based superconductors are suitable materials to study the strain dependence of physical properties because their high sensitivity to variations in the local crystal structure. Among the iron-based superconductor family, FeSe is prominent example of the interplay between superconductivity, magnetism, and electronic nematicity, which can be tuned both by chemical substitution and application of physical pressure.

Here we present the first principle study of evolution of vibrational modes of the strained FeSe superconductor. We performed systematic computational study on bulk FeSe crystals with applying in-plane uniaxial strain ranging from -1.5% to 1.5% using density functional theory formalism. We focus on the effect of the straining of the lattice constant, and consequent symmetry distortion, on characteristic A_{1g} and B_{1g} modes of FeSe. These findings are to be compared with experimental data from Raman measurements studying the trend of changes of A_{1g} and B_{1g} modes with applied strain.

The work was supported by the Science Fund of the Republic of Serbia, PROMIS, No. 6062656, StrainedFeSC.

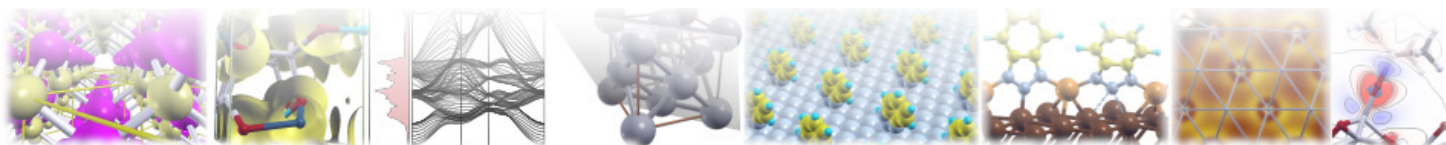


QUANTUM ESPRESSO

September 15–20, 2019

Ljubljana, Slovenia

Summer School on Advanced Materials and Molecular Modelling



BOOK OF ABSTRACTS

September 15 – 20, 2019

Jožef Stefan Institute, Ljubljana



QUANTUM ESPRESSO
FOUNDATION



DRIVING
THE EXASCALE
TRANSITION



Jožef Stefan
Institute
Ljubljana, Slovenija



Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire



Imagine. Build. Succeed.

BOOK OF ABSTRACTS: Quantum ESPRESSO Summer School on Advanced Materials and Molecular Modelling

Publisher:
Jožef Stefan Institute, Jamova 39, Ljubljana, Slovenia

Edited by:
Anton Kokalj and Matjaž Dlouhy

Layout by Matjaž Dlouhy and Anton Kokalj
Authors of the front page: Anton Kokalj and Matjaž Dlouhy

Kataložni zapis o publikaciji (CIP) pripravili v Narodni in univerzitetni knjižnici v Ljubljani
COBISS.SI-ID=301641728
ISBN 978-961-264-154-2 (pdf)

This book of abstracts is available online at <http://qe2019.ijs.si/qe2019-book-of-abstracts.pdf>

Ljubljana, Slovenia, 2019

Poster session (part I) / 15

Electron-phonon interaction and superconductivity in graphene doped with metal atoms

Author: Ms. ŠOLAJIĆ, Andrijana¹Co-Author: Dr. PESIC, Jelena¹¹ *Institute of Physics Belgrade, University of Belgrade***Corresponding Author:** solajic@ipb.ac.rs

With its outstanding mechanical and electrical properties [1,2], graphene is predicted to have a plenty of applications and has gained enormous research focus in last years. Furthermore, its already superb properties can easily be tuned by various structure manipulations including the applied strain, controlled defects, exposure to electrical or magnetic field, or doping. As opposed to pristine graphene, when doped with some alkali metal atoms adsorbed on its surface in a manner similar to the graphite intercalation compounds, graphene becomes superconducting, with critical temperatures up to 11K [3,4]. This raised an interest in research of superconductivity in graphene, which is not present in its pristine form. Here we investigate the electron-phonon interaction several structures based on graphene doped with metal atoms. In the framework of density functional theory and Eliashberg theory, we calculate the electron-phonon coupling and estimate the superconducting critical temperatures.

References:

- [1] Katsnelson, M., Novoselov, K., Geim, A., *Nat. Phys.* 2(9), 620–625 (2006)
- [2] Bolotin, K., Sikes, K., Jiang, et al., *Solid State Commun.* 146(9), 351–355 (2008)
- [3] Profeta, G., Calandra, M., Mauri, F., *Nat. Phys.* 8(2), 131–134 (2012)
- [4] Pešić, J., Gajić, R., Hingerl, K., Belić, M., *EPL* 108(6), 67005 (2014)

Poster session (part II) / 14

Computational study of vibrational properties of chemically exfoliated titanium carbide MXenes - Ti₃C₂ and TiC₂Author: Dr. PEŠIĆ, Jelena¹Co-Author: Ms. ŠOLAJIĆ, Andrijana²¹ *Institute of Physics Belgrade, University of Belgrade*² *Institute of Physics Belgrade, University of Belgrade*

Corresponding Author: yelena@ipb.ac.rs

With the increased attention to 2D materials beyond graphene a new large family extending the world of 2D materials was discovered in 2011 [1]. This is the group of early transition metal carbides and/or carbo-nitrides labeled as MXenes. MXenes are synthesized by exfoliating MAX phase ternary carbides, nitrides, or carbonitrides: Mn+1AXn, where M is an early transition metal, A is a III or IV A-group element and X is carbon/nitrogen. Acid etching is used to remove the A layer, resulting in the formation of Mn+1Xn MXene [2]. The rich chemistries and unique morphologies of MXenes, in addition to their good electronic conductivities, render them strong candidates for many applications that range from sensors and electronic device materials, conductive reinforcement additives to polymers, electrochemical energy storage materials, among many others [3, 4]. MXenes can potentially be used as additives to polymers to fabricate composites with outstanding mechanical properties and good electrical conductivities [5].

We present a comparative study on the vibrational properties of Ti₃C₂ and TiC₂ using density functional theory (DFT) calculations. Both Raman and infrared-active vibrational modes are predicted and conclusively assigned to experimental spectra as a guide for characterization. After the synthesis, HF etched MXenes were characterized using Raman spectroscopy and then further processed as additive to poly(methyl methacrylate) (PMMA) [6].

The computational analysis enabled proper assignation of MXenes modes in spectra but also modes of residual products of synthesis, TiO₂ and amorphous carbon. Further comparative analysis of DFT calculations with Raman spectra of MXene/PMMA composite offers insight in effects of PMMA matrices on MXenes modes.

References:

- [1] M. Naguib, et al., Two-Dimensional Nanocrystals Produced by Exfoliation of Ti₃AlC₂, *Advanced Materials*, 23, 4248 (2011)
- [2] A. Alhabeib, et al., Guidelines for Synthesis and Processing of Two-Dimensional Titanium Carbide (Ti₃C₂T_xMXene), *Chemistry of Materials*, 29, 7633 (2017)
- [3] B. Anasori, et al., 2D Metal Carbides and Nitrides (MXenes) for Energy Storage, *Nature Reviews Materials*, 2, 16098 (2017)
- [4] K. Hantanasirisakul, et al., Fabrication of Ti₃C₂T_x MXene Transparent Thin Films with Tunable Optoelectronic Properties, *Advanced Electronic Materials*, 2, 1600050 (2016)
- [5] X. Zhang et al. Ultrathin nanosheets of MAX phases with enhanced thermal and mechanical properties in polymeric compositions: Ti₃Si(0.75)Al(0.25)C₂ *Angew. Chem. Int. Ed.* 52, 4361, (2013)
- [6] J. Pešić et al., Structural and Optical Characterization of MXene Ti₃C₂ /PMMA (Polymethyl methacrylate) nanocomposite, manuscript in preparation

7-11th October 2019
Belgrade, Serbia



<http://www.sfkm.ac.rs/>

The 20th Symposium on Condensed Matter Physics

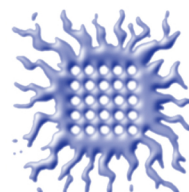
BOOK OF ABSTRACTS



University of Belgrade,
Faculty of Physics



Institute of Physics Belgrade



Vinca Institute
of Nuclear Sciences



Serbian Academy
of Sciences and Arts



Ministry of Education, Science and
Technological Development,
Republic of Serbia

Conference Chair

Cedomir Petrovic, *Brookhaven National Laboratory, USA*

Željko Šljivančanin, *Vinča Institute of Nuclear Sciences Serbia*

Program Committee

Ivan Božović, *Brookhaven National Laboratory, USA*

Vladimir Dobrosavljević, *Florida State University, USA*

Milan Damnjanović, *Faculty of Physics, University of Belgrade, Serbia*

Vladimir Djoković, *Vinča Institute, University of Belgrade, Serbia*

Gyula Eres, *Oak Ridge National Laboratory, USA*

Laszló Forró, *Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, Switzerland*

Radoš Gajić, *Institute of Physics Belgrade, University of Belgrade, Serbia*

Igor Herbut, *Simon Fraser University, Canada*

Zoran Ikonić, *University of Leeds, UK*

Ivanka Milošević, *Faculty of Physics, University of Belgrade, Serbia*

Branislav Nikolić, *University of Delaware, USA*

Cedomir Petrovic, *Brookhaven National Laboratory, USA*

Dragana Popović, *National High Magnetic Field Laboratory USA*

Zoran S. Popović, *Vinča Institute, University of Belgrade, Serbia*

Zoran V. Popović, *Institute of Physics, University of Belgrade, Serbia*

Zoran Radović, *Faculty of Physics, University of Belgrade, Serbia*

Miljko Satarić, *Faculty of Technical Sciences, University of Novi Sad, Serbia*

Vojislav Stamenković, *Argonne National Laboratory, USA*

Željko Šljivančanin, *Vinča Institute, University of Belgrade, Serbia*

Bosiljka Tadić, *Jožef Štefan Institute, Slovenia*

Milan Tadić, *School of Electrical Engineering, University of Belgrade, Serbia*

Darko Tanasković, *Institute of Physics, University of Belgrade, Serbia*

Organizing Committee

Jelena Pešić, *Institute of Physics Belgrade*

Andrijana Šolajić, *Institute of Physics Belgrade*

Petar Mali, *Faculty of Sciences, University of Novi Sad*

Jelena Pajović, *Faculty of Physics, University of Belgrade, Serbia*

Srđan Stavrić, *Vinča Institute of Nuclear Sciences*

Svetislav Mijatović, *Faculty of Physics, University of Belgrade, Serbia*

Božidar Nikolić, *Faculty of Physics, University of Belgrade, Serbia – chair*

Organized by

Institute of Physics Belgrade

Faculty of Physics, University of Belgrade

Vinča Institute of Nuclear Sciences

Serbian Academy of Sciences and Arts

K. Djordjević, S. Galović, M. Jordović-Pavlović, M. Nešić, M. Popović, Ž. Čojbašić And D. Markushev Neural Network Based Reverse-Back Procedure For Photoacoustic Electronic Characterization Of Semiconductors	20
S. Djurdjić-Mijin, A. Šolajić, J. Pešić, M. Šćepanović, Y. Liu, A. Baum, C. Petrovic, N. Lazarević, and Z. V. Popović The Vibrational Properties Of CrI3 Single Crystals.....	21
Saša Dmitrović, Ivanka Milošević, Tatjana Vuković and Milan Damnjanović Classification Of Quasi-One-Dimensional Topological Crystalline Phases: Topological Quantum Chemistry Approach.....	22
L. Forró Why Are Hybrid Halide Perovskites Exciting Materials?	23
I. Franović Macroscopic Variability In Modular Neural Networks.....	24
So. Gombar, P.Mali, M. Pantić, M. Pavkov-Hrvojević and S. Radošević Analysis Of The Frenkel Excitons Dynamics In Pentacene.....	25
R. Gross Engineering Quantum States With Superconducting Quantum Circuits.....	26
G. Eres Real-Time Study of Oxygen Vacancy Ordering Dynamics at Complex Oxide Heterostructure Interfaces.....	28
R. Hackl Electronic Collective Modes As A Diagnostic Tool For Pairing In Superconductors	29
I. Herbut Tensorial (D-Wave) Superconducting Order In Luttinger Semimetals.....	30
J. Resl, C. Reitböck, E. E. Lopez, A. Alejo-Molina, K. Hingerl Concepts For Understanding Nonlinear Second Harmonic Generation Of Bulk Silicon	31
Liv Hornekær Engineering The Electronic And Chemical Properties Of Graphene Via Functionalization And Intercalation	33
A. Hudomal, I. Vasić, N. Regnault And Z. Papić Searching For Quantum Scars In Constrained Bosonic Model	34
Z. Ikonić Electronic Structure Engineering Of Sigesn(C) Alloys For Optoelectronic And Thermoelectric Applications	35
G. Isić, S.Vuković, Z.Jakšić And M.Belić Spontaneous Emission In Metallodielectric Superlattices	36
S. Janičević, D. Jovković, L. Laurson And Đ. Spasojević The Effect Of Thresholding On Interevent Correlations	37
V. Janković and N. Vukmirović Light-To-Charge Conversion In Organic Photovoltaics: Mechanisms And Timescales	38
V. Janković and T.Mančal A Step Towards A Comprehensive Steady-State Picture Of Photosynthetic Solar Energy	

The vibrational properties of CrI₃ single crystals

S. Djurdjić-Mijin,¹ A. Šolajić,¹ J. Pešić,¹ M. Šćepanović,¹ Y. Liu,² A. Baum,^{3,4} C. Petrovic,² N. Lazarević,¹ and Z. V. Popović^{1,5}

¹Center for Solid State Physics and New Materials, Institute of Physics Belgrade, University of Belgrade, Pregrevica 118, 11080 Belgrade, Serbia

²Condensed Matter Physics and Materials Science Department, Brookhaven National Laboratory, Upton, New York 11973-5000, USA

³Walther Meissner Institut, Bayerische Akademie der Wissenschaften, 85748 Garching, Germany

⁴Fakultät für Physik E23, Technische Universität München, 85748 Garching, Germany

⁵Serbian Academy of Sciences and Arts, Knez Mihailova 35, 11000 Belgrade, Serbia

Abstract. CrI₃ is a two-dimensional layered material and a ferromagnetic [1] with Curie temperature of 61K [1,2] and first order phase transition that occurs at 220K [3,4]. This class of materials has recently gained a lot of attention due to numerous potential applications. Here we represent our work consisting of both experimental and theoretical Raman scattering study of CrI₃ lattice dynamics. Based on our results we can distinguish two different phases for CrI₃ with monoclinic (*C2/m*) being the high-temperature and rhombohedral (*R3*) phase being the low-temperature phase. Abrupt changes to the spectra were found at the first order phase transition which was located at $T_s \approx 180$ K, lower than in previous studies. In contrast to the prior reports we found no sign of phase coexistence over temperature range exceeding 5 K [5].

REFERENCES

- [1] E. Navarro-Moratalla, B. Huang, G. Clark *et al.*, Layer dependent ferromagnetism in a van der Waals crystal down to the monolayer limit, *Nature (London)* **546**, 270 (2017).
- [2] J. F. Dillon, Jr. and C. E. Olson, Magnetization, resonance, and optical properties of the ferromagnet CrI₃, *J. Appl. Phys.* **36**, 1259 (1965).
- [3] M. A. McGuire, H. Dixit, V. R. Cooper, and B. C. Sales, Coupling of crystal structure and magnetism in the layered, ferromagnetic insulator CrI₃, *Chem. Mater.* **27**, 612 (2015).
- [4] D. T. Larson and E. Kaxiras, Raman Spectrum of CrI₃: An *ab initio* study, *Phys. Rev. B* **98**, 085406 (2018).
- [5] S. Djurdjić-Mijin, A. Šolajić, J. Pešić, M. Šćepanović, Y. Liu, A. Baum, C. Petrovic, N. Lazarević, and Z. V. Popović, Lattice dynamics and phase transition in CrI₃ single crystals, *Phys. Rev. B* **98**, 104307 (2018.)

Strain effects on vibrational properties in hexagonal 2D materials from the first principles – doped graphene and MgB₂- monolayer study

Jelena Pešić^a, Andrijana Šolajić^a and Radoš Gajić^a

^aCenter for Solid State Physics and New Materials,
Institute of Physics Belgrade, University of Belgrade, Serbia

Abstract. We present computational study within the density functional theory framework of the effects of application of the (equi) biaxial strain on the two isostructural two-dimensional materials, Li-intercalated graphene and magnesium-diboride monolayer, both electron-phonon mediated superconductors [1-4]. The application of the tensile biaxial strain causes softening of the phonons, enhancing the total electron-phonon interaction and resulting in significantly a higher critical temperature. By application of the strain, we achieve the increase of the density of states at the Fermi level and softening of the modes [2,4,5]. Without drastically modifying the structure, with experimentally achievable strain [2,5], we significantly affect the electron-phonon coupling strength.

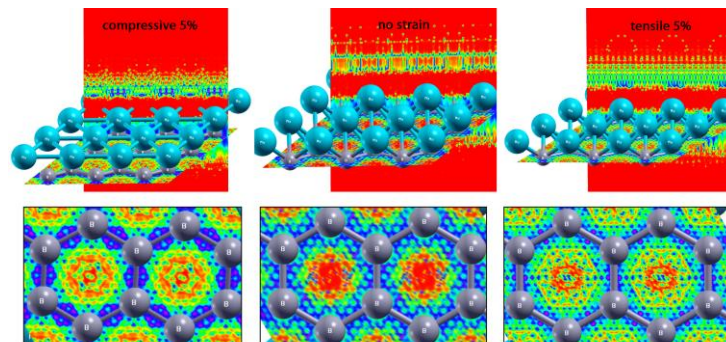


FIGURE 1. Electron localization function (ELF) for MgB₂-mono nonstrained and compressively (left) and tensely (right) strained. Top: 3D projection of ELF with focus on the Mg layer. Bottom: ELF projection on the B layer.

REFERENCES

1. G. Profeta, M. Calandra, F. Mauri, *Nature Physics* **8**, 131–134 (2012).
2. J. Pešić, R. Gajić, K. Hingerl, M. Belić, *Europhysics Letters*, **108** (6), 67005, (2014)
3. J. Bekaert, A. Aperis, B. Partoens, P.M. Oppeneer, M.V. Milošević, *Physical Review B* **96** (9), 094510, (2017)
4. J. Pešić, I Popov, A. Šolajić, V. Damljanović, K. Hingerl, M. Belić, R. Gajić, *Condensed Matter* **4** (2), 37 (2019)
5. V. Čelebonović, J. Pešić, R. Gajić, B. Vasić, A. Matković, *Journal of Applied Physics* **125** (15), 154301 (2019)

Lattice dynamics and phase transitions in $\text{Fe}_{3-x}\text{GeTe}_2$

A. Milosavljević^a, A. Šolajić^a, S. Djurdjić Mijin^a, J. Pešić^a, B. Višić^a, Y. Liu^b, C. Petrovic^b, N. Lazarević^a and Z. V. Popović^c

^aCenter for Solid State Physics and New Materials, Institute of Physics Belgrade, University of Belgrade, Pregrevica 118, 11080 Belgrade, Serbia

^bCondensed Matter Physics and Materials Science Department, Brookhaven National Laboratory, Upton, New York 11973-5000, USA

^cCenter for Solid State Physics and New Materials, Institute of Physics Belgrade, University of Belgrade, Pregrevica 118, 11080 Belgrade, Serbia and Serbian Academy of Sciences and Arts, Knez Mihailova 35, 11000 Belgrade, Serbia

Abstract. A new class of magnetic van der Waals bonded materials has recently become of great interest, as a suitable candidates for various applications. Whereas CrXTe_3 ($X = \text{Si, Ge, Sn}$) and CrX_3 ($X = \text{Cl, Br, I}$) classes maintain low phase transition temperatures even in a monolayer regime, $\text{Fe}_{3-x}\text{GeTe}_2$ has a high bulk transition temperature, between 220 and 230 K, making it a promising applicant.

Here we present DFT calculations of lattice dynamics and Raman spectroscopy measurements of the van der Waals bonded ferromagnet $\text{Fe}_{3-x}\text{GeTe}_2$ [1]. Four out of eight Raman active modes are observed and assigned, in agreement with numerical calculations. The energies and linewidths of the observed modes display an unconventional temperature dependence at about 150 and 220 K, followed by the nonmonotonic evolution of the Raman continuum. Whereas the former can be related to the magnetic phase transition, the origin of the latter anomaly remains an open question.

REFERENCES

1. A. Milosavljević, A. Šolajić, S. Djurdjić-Mijin, J. Pešić, B. Višić, Yu Liu, C. Petrovic, N. Lazarević, and Z. V. Popović. "Lattice dynamics and phase transitions in $\text{Fe}_{3-x}\text{GeTe}_2$." *Physical Review B* 99, no. 21 (2019): 214304.

Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP) Ecosystem

Book of Abstracts

HPC Centre, University of Évora, Portugal
06-07 February 2023

Contents

Best practices using VASP: Parallelisation and HPC resources	1
Predicting and understanding phase stability using lattice-dynamics modelling	1
Influence of alloying elements on phase stability in nickelbase superalloys	2
Anharmonic lattice dynamics and phonon transport in extended solids	2
Ultrafast control of complex oxide functional properties: New insights from theory and electronic structure calculations	3
Lowering lattice thermal conductivity in Barium chalcogenides through lattice expansion	3
Lattice Dynamics in Ferrimagnetic Layered van der Waals Material Mn₃Si₂Te₆	4
Application of MXenes in heterogeneous catalysis: A computational perspective	4
Modelling the evolution of oxide nanoparticles in the presence adsorbed molecules	5
Light and elevated temperature degradation of silicon solar cells: how is HPC cracking it?	6
Activation of metal-free porous basal plane of Biphenylene through defects engineering for Hydrogen evolution reaction	6
Theoretical investigation of adatom doping of transition metal in hGY for electrocatalytic Oxygen evolution reaction	7
Multiscale modelling of piezoelectric composite materials for microfluidic pumps in implantable medical device	7
Designing and investigation of alkali decorated graphene and boron nitride nanostructures for hydrogen storage: A first principles study	8
Mechanical and thermodynamic properties of the some B2 rare-earth intermetallic compounds: Ab initio study and data mining approach	8
Identification and assessment of electrides	8
The Joint Automated Repository for Various Integrated Simulations (JARVIS) for novel materials discovery and design	9
Non-Abelian braiding of phonons from first principles	10
Properties of materials under high-pressure	10

Lattice Dynamics in Ferrimagnetic Layered van der Waals Material $\text{Mn}_3\text{Si}_2\text{Te}_6$ (CT)

Jelena Pešić¹, Andrijana Šolajić¹, Sanja Djurdžić¹, Yu Liu², Cedomir Petrović², Michel Bockstedte³, Alberta Bonanni⁴, Zoran Popović⁵, & Nenad Lazarević¹

¹ Institute of Physics Belgrade, University of Belgrade, Serbia

² Condensed Matter Physics and Materials Science Department, Brookhaven National Laboratory, Upton, USA

³ Institute for Theoretical Physics, Johannes Kepler University Linz, Austria

⁴ Institute of Semiconductor and Solid-State Physics, Johannes Kepler University Linz, Austria

⁵ Serbian Academy of Sciences and Arts, Belgrade, Serbia

Email: yelena@ipb.ac.rs

$\text{Mn}_3\text{Si}_2\text{Te}_6$ single crystals were first synthesized in 1985 [1], however, few studies were carried out on this compound since. It was only recently that the attention has shifted to them, mainly through the comparisons with quasi-two-dimensional materials, specifically CrSiTe_3 . Layered magnetic van der Waals materials have lately received widespread attention due to their relevance for spintronics, magneto-electronics and data storage.

$\text{Mn}_3\text{Si}_2\text{Te}_6$ crystalizes in a trigonal $P\bar{3}1c$ crystal structure (No. 163 space group) [2]. First principle calculations suggested a competition between ferrimagnetic ground state and three additional magnetic configurations, originating from antiferromagnetic exchange for the three nearest Mn-Mn pairs [2]. Here we present a first principle study with the focus on the phonon properties [3]. We compare our computational results with experimental Raman scattering of $\text{Mn}_3\text{Si}_2\text{Te}_6$ single crystals. Eighteen Raman-active modes are identified, fourteen of which are assigned according to the trigonal symmetry. Five A_{1g} modes and nine E_g modes are observed and assigned according to the $P\bar{3}1c$ symmetry group. Four additional peaks to the ones ascribed to the $P\bar{3}1c$ symmetry group and obeying the A_{1g} selection rules, are attributed to overtones. A pronounced asymmetry of the A_{1g}^5 phonon mode is evidenced at 100K and 300 K. The unconventional temperature evolution of the A_{1g}^5 Raman mode reveals three successive, possibly magnetic, phase transitions that are expected to have significant impact on the strength of the spin-phonon interaction in $\text{Mn}_3\text{Si}_2\text{Te}_6$. These are suggested to be caused by the competition between the various magnetic states, which are close in energy.

This study provides a comprehensive insight into the lattice properties of the considered system and shows arguments for the emergence of competing short-range magnetic phases in $\text{Mn}_3\text{Si}_2\text{Te}_6$.

The calculations are based on the density functional theory formalism as implemented in the Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP) [4-7], with the plane wave basis truncated at a kinetic energy of 520 eV, using the Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) exchange-correlation functional [8] and the projector augmented wave (PAW) method [9,10]. The Monkhorst and Pack scheme of the k point sampling is employed to integrate over the first Brillouin zone with $12 \times 12 \times 10$ at the Γ -centered grid. The convergence criteria for energy and force have been set to 10^{-6} eV and $0.001 \text{ eV}\text{\AA}^{-1}$, respectively. The DFT-D2 method of Grimme is employed for van der Waals corrections [11]. The vibrational modes are calculated applying the density functional perturbation theory implemented in VASP and Phonopy [12].

Application of MXenes in heterogeneous catalysis: A computational perspective (CT)

José D. Gouveia & José R. B. Gomes

CICECO-Aveiro Institute of Materials, University of Aveiro, Portugal

Email: jrgomes@ua.pt

The catalytic activities of several different heterogeneous catalysts, ranging from planar extended surfaces to clusters and particles with different shapes, sizes or compositions, have been experimentally determined for a long time. However, a fully understanding of the catalytic mechanisms is a defiant task because of the large number of variables that determine the performance of the catalyst. Therefore, to isolate the effect of each variable, studies using well-controlled conditions that allow separating the influence of different parameters in the global catalytic processes are required. Computer modelling arises as a very adequate strategy since the composition of the systems can be fully controlled, with relevant information being retrieved when combined with electronic structure methods. In this communication, we will present results