

ИНСТИТУТ ЗА ФИЗИКУ			
ПРИМЉЕНО:		06-08-2025	
Рад.јед.	б р о ј	Арх.шифра	Прилог
0801	1310/1		

Научном већу Института за физику у Београду

Београд, 06.08.2025

Предмет:

Молба за покретање поступка за стицање звања истраживач-сарадник

На основу испуњености услова предвиђених Правилником о стицању истраживачких и научних звања, прописаног од стране ресорног Министарства, молим Научно веће Института за физику у Београду да покрене поступак за мој избор у звање истраживач сарадник.

У прилогу достављам:

1. Потписани Захтев кандидата за покретање поступка;
2. Мишљење руководиоца лабораторије са предлогом комисије за избор у звање;
3. Кратку стручну биографију;
4. Кратак преглед научне активности;
5. Списак публикација;
6. Потврду о статусу студента докторских студија;
7. Потврду о пријављеној теми докторске дисертације;
8. Копије диплома основних и мастер студија;
9. Копије публикација.

С поштовањем,

Теа Белојица

истраживач приправник

ИНСТИТУТ ЗА ФИЗИКУ			
ПРИМЉЕНО: 06-08-2025			
Рад.јед.	б р о ј	Арх.шифра	Прилог
0801-1310/2			

Научном већу Института за физику у Београду

Предмет: Мишљење руководиоца о избору Тее Белојице у звање истраживач сарадник

Тео Белојица је запослена на Институту за физику у Београду. Од децембра 2022. године ангажована је у Лабораторији за квантне материјале Центра за физику чврстог стања и нове материјале, где израду докторске дисертације обавља под менторством др Ане Милосављевић.

С обзиром на то да испуњава све услове прописане Законом о науци и истраживањима, као и Правилником о стицању истраживачких и научних звања, који је донело Министарство науке, технолошког развоја и иновација, сагласан сам са покретањем поступка и предлажем избор Тее Белојице у звање истраживач сарадник.

За састав Комисије за избор Тее Белојице у звање истраживач сарадник предлажем следеће чланове:

др Ана Милосављевић, научни сарадник, Институт за физику у Београду

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

др Зорица Поповић, ванредни професор, Универзитет у Београду – Физички факултет



др Ненад Лазаревић
научни саветник Института за физику
руководилац Центра за физику чврстог стања
и нове материјале

Стручна биографија

Теа Белојица је рођена 30.3.1997. године у Сарајеву. Након завршене основне школе и опште гимназије, 2015. године уписала је Физички факултет Универзитета у Београду, смер Теоријска и експериментална физика. Дипломирала је 2020. године са просечном оценом 8,54.

Школске 2020/21 године уписала је мастер студије физике, смер Теоријска и експериментална физика. Под менторством др Ненада Лазаревића, а суштинским менторством др Ане Милосављевић, 4. октобра 2021. године одбранила је мастер рад на тему „Нееластично расејање светлости на InSiTe_3 “ и тиме завршила мастер студије са просечном оценом 10,00.

За време и након завршетка мастер студија била је запослена у настави физике у Савременој гимназији и Земунској гимназији.

Докторске академске студије, уже научне области: Физика кондензоване материје и статистичка физика, уписала је 2022. године на Физичком факултету Универзитета у Београду. Свој научно истраживачки рад остварује у Центру за физику чврстог стања и нове материјале Института за физику у Београду, под менторством др Ане Милосављевић, где је од децембра 2022. године запослена као истраживач приправник.

Од јануара 2024. ангажована је на пројекту „*Dynamics of CDW transition in strained quasi-1D systems -DYNAMIQS*“ (10925) Фонда за науку Републике Србије. Учесник је и интерног истраживачког пројекта Института за физику за младе истраживаче у оквиру SAIGE програма – SEED RESEARCH GRANT, под називом „*Visualization of strain tuned nematicity in FeSe*“ (мај–септембар 2024). Учествовала је у организацији међународне конференције „*Advances in Solid State Physics and New Materials*“ (2025).

Тема докторске дисертације под руководством др Ане Милосављевић под називом „*Raman signatures of correlated phases in van der Waals materials*“ одбрањена је на колегијуму физичког факултета 18. јуна 2025. године.

Преглед научне активности кандидаткиње

Главна област истраживања Тее Белојице јесте испитивање особина ван дер Валсових материјала методом Раманове спектроскопије.

На институт за физику долази као студент мастер студија где је под менторством др Ненада Лазаревића, и суштинским менторством др Ане Милосављевић, написала свој истраживачки мастер рад из области квази-2Д материјала под називом “Нееластично расејање светлости на InSiTe_3 ”.

Запослена је од децембра 2022. године у Центру за чврсто стање и нове материјале у Лабораторији за квантне материјале, где се као истраживач приправник бави испитивањем ван дер Валсових материјала методом Раманове спектроскопије. Учесник је четири међународне конференције. Тема докторске дисертације под руководством др Ане Милосављевић под називом „Raman signatures of correlated phases in van der Waals materials“ одбрањена је на колегијуму Физичког факултета, 18. јуна 2025. године.

Учесник је пројекта Фонда за науку под акронимом “DYNAMIQS” (2024-2025) чији је циљ истраживање утицаја напрезања, температуре, допирања и интеркалације на особине трихалида прелазних метала, као и интерног истраживачког пројекта Института за физику за младе истраживаче у оквиру SAIGE програма – SEED RESEARCH GRANT, под називом „Visualization of strain tuned nematicity in FeSe“ (мај–септембар 2024).

Фокус њеног даљег истраживања биће испитивање температурске зависности структурних особина као и утицаја напрезања на ван дер Валсове материјале методом Раманове спектроскопије са посебним нагласком на структурне нестабилности, фазне прелазе и феномене нарушења симетрије.

Списак публикација

Категорија М34:

1. **T. Belojica**, A. Milosavljević, S. Djurdjić Mijin, J. Blagojević, A. Šolajić, J. Pešić, B. Višić, V. Damljanović, M. O. Ogunbunmi, S. Bobev, Yu Liu, C. Petrovic, Z. Popovic, R. Hackl, N. Lazarevic, „Raman Signatures of Instabilities in InSiTe_3 “ in Abstract Book of *Advances in Solid State Physics and New Materials (Advances 2025)*, May 19th – 23rd, 2025, Belgrade, Serbia, page 149. (Available: <https://www.advances25.solidstate.ipb.ac.rs/wp-content/uploads/2025/05/abstractbook.pdf>)
2. A. Milosavljević, J. Blagojević, **T. Belojica**, B. Višić, S. Djurdjić Mijin, M. Opačić, A. Šolajić, J. Pešić, A. Wang, C. Petrovic, R. Hackl, N. Lazarević, „Anisotropic Strain Response in FeSe “ in Abstract Book of *Advances in Solid State Physics and New Materials (Advances 2025)*, May 19th–23rd, 2025, Belgrade, Serbia, page 79. (Available: <https://www.advances25.solidstate.ipb.ac.rs/wp-content/uploads/2025/05/abstractbook.pdf>)
3. **T. Belojica**, J. Blagojević, S. Djurdjić Mijin, A. Šolajić, J. Pešić, B. Višić, V. Damljanović, M. O. Ogunbunmi, S. Bobev, Yu Liu, C. Petrovic, Z. V. Popovic, A. Milosavljević, N. Lazarevic “Study of crystal phases and temperature dependence of InSiTe_3 ” in Abstract Book of the *Twenty-Second Young Researchers Conference – Materials Science and Engineering (YRC 2024)*, December 4th-6th, 2024, Belgrade, Serbia, page 36. (Available: <https://www.mrs-serbia.org.rs/index.php/yrp-books-of-abstracts/22-yrp-2024>)
4. **T. Belojica**, A. Milosavljević, S. Djurdjić Mijin, A. Šolajić, J. Pešić, B. Višić, Yu Liu, C. Petrovic, Z. Popovic, N. Lazarevic, „Crystal structure and phase transitions in InSiTe_3 “ in Abstract Book of *The 21st Symposium on Condensed Matter Physics (SFKM 2023)*, June 26th–30th, 2023, Belgrade, Serbia, page 76. (Available: <https://www.sfkm2023.ipb.ac.rs/wp-content/uploads/2023/06/abstractbook.pdf>)
5. A. Milosavljević, S. Djurdjić Mijin, **T. Belojica**, A. Šolajić, J. Pešić, B. Višić, Yu Liu, C. Petrovic, Z. V. Popovic, N. Lazarevic “Crystal structure of InSiTe_3 studied by Raman spectroscopy” in Abstract Book of the *Twentieth Young Researchers Conference – Materials Science and Engineering (YRC 2022)*, November 30th- December 2nd, 2024, Belgrade, Serbia, page 43. (Available: https://www.mrs-serbia.org.rs/images/20YRC/20YRC-Book_of_Abstracts.pdf)



Република Србија
Универзитет у Београду
Физички факултет
Д.Бр.2022/8028
Датум: 15.07.2025. године

На основу члана 161 Закона о општем управном поступку и службене евиденције издаје се

УВЕРЕЊЕ

Белојица (Милорад) Теа, бр. индекса 2022/8028, рођена 30.03.1997. године, Сарајево, Босна и Херцеговина, уписана школске 2024/2025. године, у статусу: финансирање из буџета; тип студија: докторске академске студије; студијски програм: Физика.

Према Статуту факултета студије трају (број година): три.
Рок за завршетак студија: у двоструком трајању студија.

Ово се уверење може употребити за регулисање војне обавезе, издавање визе, права на дечији додатак, породичне пензије, инвалидског додатка, добијања здравствене књижице, легитимације за повлашћену возњу и стипендије.

Овлашћено лице факултета



Република Србија
Универзитет у Београду
Физички факултет
Д.Бр.2022/8028
Датум: 15.07.2025. године

На основу члана 161 Закона о општем управном поступку и службене евиденције издаје се

УВЕРЕЊЕ

Белојица (Милорад) Теа, бр. индекса 2022/8028, рођена 30.03.1997. године, Сарајево, Босна и Херцеговина, уписана школске 2024/2025. године, у статусу: финансирање из буџета; тип студија: докторске академске студије; студијски програм: Физика.

Према Статуту факултета студије трају (број година): три.
Рок за завршетак студија: у двоструком трајању студија.

Ово се уверење може употребити за регулисање војне обавезе, издавање визе, права на дечији додатак, породичне пензије, инвалидског додатка, добијања здравствене књижице, легитимације за повлашћену возњу и стипендије.

Овлашћено лице факултета





ДОКТОРСКЕ СТУДИЈЕ

ПРЕДЛОГ ТЕМЕ ДОКТОРСКЕ ДИСЕРТАЦИЈЕ
КОЛЕГИЈУМУ ДОКТОРСКИХ СТУДИЈАIII колска година
2024/2025

Подаци о студенту

Име

Tea

Презиме

Белојица

Број индекса

8028/2022

Научна област дисертације

ФИЗИКА КОНДЕНЗОВАНЕ МАТЕРИЈЕ
и СТАТИСТИЧКА ФИЗИКА

Подаци о ментору докторске дисертације

Име

Ана

Презиме

Милосављевић

Научна област

ФИЗИКА КОНДЕНЗОВАНЕ
МАТЕРИЈЕ

Звање

НАУЧНИ САРАДНИК

Институција

Институт за физику
у Београду

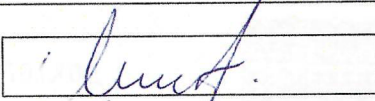
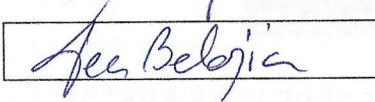
Предлог теме докторске дисертације

Наслов

Raman signatures of correlated phases in van
der Waals materials

Уз пријаву теме докторске дисертације Колегијуму докторских студија, потребно је приложити следећа документа:

1. Семинарски рад (дужине до 10 страница)
2. Кратку стручну биографију писану у трећем лицу јединине
3. Фотокопију индекса са докторских студија

Потпис ментора	
Потпис студента	
Датум	25.4.2025.

Мишљење Колегијума докторских студија	
Након образложења теме докторске дисертације Колегијум докторских студија је тему	
прихватио ☒	није ☐ хватио ☐
Датум	Продекан за науку Физичког факултета
18.6.2025.	Ивано Тошић



Република Србија
Универзитет у Београду

УБ

Оснивач: Република Србија
Дозволу за рад број 612-00-02666/2010-04 од 12. октобра 2011.
године је издало Министарство просвете и науке Републике Србије

Физички факултет, Београд

Оснивач: Република Србија
Дозволу за рад број 612-00-02409/2014-04 од 8. септембра 2014. године је издало
Министарство просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије



Диплома

Теа, Милорад, Белојица

рођена 30. марта 1997. године, Сарајево, Босна и Херцеговина, уписана школске
2015/2016. године, а дана 30. септембра 2020. године завршила је основне академске
студије, првог степена, на студијском програму Теоријска и експериментална физика,
обима 240 (двеста четрдесет) бодова ЕСПБ са просечном оценом 8,54 (осам и 54/100).

На основу тога издаје јој се ова диплома о стицању високог образовања и стручном називу
дипломирани физичар

Број: 11399800

У Београду, 1. децембра 2020. године

Декан
Проф. др Иван Белча

Ректор
Проф. др Иванка Појовић

00114300



Република Србија
Универзитет у Београду

Оснивач: Република Србија

Дозволу за рад број 612-00-02666/2010-04 од 12. октобра 2011.
године је издало Министарство просвете и науке Републике Србије

Физички факултет, Београд

Оснивач: Република Србија

Дозволу за рад број 612-00-02409/2014-04 од 8. септембра 2014. године је издало
Министарство просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије

УБ



Диплома

Теа, Милорад, Белојица

рођена 30. марта 1997. године, Сарајево, Босна и Херцеговина, уписана школске
2020/2021. године, а дана 4. октобра 2021. године завршила је мастер академске
студије, другој седиш, на студијском програму Теоријска и експериментална
физика, обима 60 (шездесет) бодова ЕСПБ са просечном оценом 10,00 (десет и 0/100).

На основу тога издаје јој се ова диплома о сачењеном високом образовању и академском називу

мастер физичар

Број: 12837900

У Београду, 1. новембра 2021. године

Декан
Проф. др Иван Белча

Ректор
Проф. др Владан Ђокић

00128600

Raman Signatures Of Instabilities In InSiTe₃

T. Belojica^a, A. Milosavljević^a, S. Djurdjić Mijin^{ba}, J. Blagojević^a, A. Šolajić^a, J. Pešić^a, B. Višić^a, V. Damjanović^a, M. O. Ogunbunmi^c, S. Bobev^{cd}, Yu Liu^d, C. Petrović^{def}, Z. Popović^g, R. Hackl^{hi}, and N. Lazarević^a

^a*Institute of Physics Belgrade, University of Belgrade, Pregrevica 118, 11080 Belgrade, Serbia*

^b*Departamento de Física de Materiales, Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid, 28049 Madrid, Spain*

^c*Department of Chemistry and Biochemistry, University of Delaware, Newark, Delaware 19716, USA*

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

^e*Department of Nuclear and Plasma Physics, Vinca Institute of Nuclear Sciences, University of Belgrade, Belgrade 11001, Serbia*

^f*Shanghai Advanced Research in Physical Sciences (SHARPS), Shanghai 201203, China*

^g*Serbian Academy of Sciences and Arts, Knez Mihailova 35, 11000 Belgrade, Serbia*

^h*School of Natural Sciences, Technische Universität München, Garching 85748, Germany*
ⁱ*IFW Dresden, Helmholtzstrasse 20, Dresden 01069, Germany*

Abstract. Layered van der Waals materials have gained considerable interest for their unique physical properties, yet InSiTe₃ remains largely unexplored due to uncertainties surrounding its crystal structure. In this work, we present a comprehensive experimental and theoretical investigation of InSiTe₃, confirming a rhombohedral structure with $P\bar{3}$ space group symmetry via single-crystal X-ray diffraction. Polarization-resolved Raman scattering reveals nine out of ten Raman-active modes expected for this symmetry, further validating the structural assignment. Beyond conventional phonon behavior, we identify strong anharmonicity and the emergence of a self-organized coherent phonon state associated with a high-energy A_g mode near 500 cm⁻¹. Analysis of phonon-phonon coupling parameters indicates that A_g modes exhibit coupling strengths up to eight times greater than E_g modes. Temperature-dependent Raman measurements from 80 to 300 K reveal notable changes in A_g mode intensities around 200 K and the appearance of broad spectral features in the phonon gap region, attributed to overtone excitations. Our findings point to an intrinsic lattice instability in InSiTe₃, driven by strong anharmonic interactions. However, further studies are required to fully uncover the microscopic origin of these instabilities and their implications for the material's physical properties.

*This research was supported by the Science Fund of the Republic of Serbia, 10925, Dynamics of CDW transition in strained quasi-1D systems – DYNAMIQS

Anisotropic Strain Response in FeSe

A. Milosavljević^a, J. Blagojević^a, T. Belojica^a, B. Višić^a, S. Djurdjić Mijin^{a, b}, M. Opačić^a, A. Šolajić^a, J. Pešić^a, A. Wang^c, C. Petrović^{c, d, e}, R. Hackl^{f, g} and N. Lazarević^a

^a*Institute of Physics Belgrade, University of Belgrade, Pregrevica 118, 11080 Belgrade, Serbia*

^b*Departamento de Física de Materiales, Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid, 28049 Madrid, Spain*

^c*Condensed Matter Physics and Material Science Department, Brookhaven National Laboratory, Upton, NY 11973-5000, USA*

^d*Shanghai Advanced Research in Physical Sciences (SHARPS), Shanghai 201203, China*

^e*Department of Nuclear and Plasma Physics, Vinca Institute of Nuclear Sciences, University of Belgrade, Belgrade 11001, Serbia*

^f*School of Natural Sciences, Technische Universität München, Garching 85748, Germany*

^g*IFW Dresden, Helmholtzstrasse 20, Dresden 01069, Germany*

Abstract.

Unconventional superconductivity often arises in materials with complex interactions, where competing ordered states such as magnetism, nematicity, and superconductivity, interact and sometimes overlap, making their nature elusive. Among iron-based superconductors, the isostructural FeSe and FeS may appear similar but they differ significantly in their physical properties. While FeSe undergoes a nematic and structural phase transition, FeS shows no structural transition even at the lowest temperatures, with its critical temperature (T_c) halved compared to FeSe. Interestingly, substituting selenium with sulfur in FeSe suppresses the nematic transition temperature to zero near a quantum critical point (QCP), which coincides with a significant drop in T_c . It has been suggested that while spin-fluctuations dominate below the QCP and significantly affect electron-phonon interactions, nematic fluctuations become prominent above the QCP. Here, we present a detailed Raman scattering study of FeSe under uniaxial strain applied along two high-symmetry crystallographic directions, $\langle 110 \rangle$ and $\langle 100 \rangle$, to investigate how symmetry-breaking perturbations affect its lattice dynamics. Our results reveal a pronounced anisotropy in the phonon response to strain: orthorhombic distortion along the $\langle 110 \rangle$ direction leads to a moderate narrowing of the temperature window over which phonon anomalies occur, while strain along $\langle 100 \rangle$ which introduces rhombohedral distortion, results in a significant broadening of the temperature range over which phonon mode splitting, and energy and linewidth anomalies are observed. We find that the fully symmetric A_{1g} phonon mode is particularly sensitive to symmetry-breaking perturbations, while the B_{1g} phonon mode remains largely unaffected.

*This research was supported by the Science Fund of the Republic of Serbia, 10925, Dynamics of CDW transition in strained quasi-1D systems - DYNAMIQS

6-2

Study of crystal phases and temperature dependence of InSiTe₃

T. Belojica¹, J. Blagojević¹, S. Djurđić Mijin^{1,2}, A. Šolajić¹, J. Pešić¹, B. Višić¹, V. Damljanović¹, M. O. Ogunbunmi³, S. Bobev^{3,4}, Yu Liu⁴, C. Petrovic^{4,5,6}, Z.V. Popović⁷, A. Milosavljević¹, N. Lazarević¹

¹Center for Solid State Physics and New Materials, Institute of Physics Belgrade, University of Belgrade, Pregrevica 118, 11080 Belgrade, Serbia, ²Departamento de Fisica de Materiales, Facultad de Ciencias, Universidad Autonoma de Madrid, 28049 Madrid, Spain, ³Department of Chemistry and Biochemistry, University of Delaware, Newark, Delaware 19716, U.S.A., ⁴Condensed Matter Physics and Materials Science Department, Brookhaven National Laboratory, Upton, NY 11973-5000, USA, ⁵Shanghai Advanced Research in Physical Sciences (SHARPS), Shanghai 201203, China, ⁶Department of Nuclear and Plasma Physics, Vinca Institute of Nuclear Sciences, University of Belgrade, Belgrade 11001, Serbia, ⁷Serbian Academy of Sciences and Arts, Knez Mihailova 35, 11000 Belgrade, Serbia

In recent years, quasi-low-dimensional materials have attracted significant attention due to their distinctive properties and possible applications in nanoelectronics and spintronics. The material of a specific interest within this group is InSiTe₃. Unlike related compounds, such as CrSiTe₃ and CrGeTe₃, research results InSiTe₃ are limited, most likely due to the unclear nature of its crystal structure. Detailed experimental and theoretical investigation was conducted to determine the crystal structure of InSiTe₃. Inelastic light scattering experiment performed on the InSiTe₃ reveals presence of six ($3A_{1g} + 3E_g$) out of eight and seven ($5A_g + 2E_g$) out of ten Raman active modes for proposed $P\bar{3}1m$ and $P\bar{3}$ space groups, respectively. These findings suggest a coexistence of two trigonal crystal phases: a high symmetry one corresponding to $P\bar{3}1m$ and a lower symmetry one that corresponds to $P\bar{3}$ space group. Additional excitations were detected in parallel scattering configuration; two broad features in the gap of PDOS that can be a consequence of two-phonon processes and a third one, at about 500 cm⁻¹ that might indicate local symmetry breaking at nano scale. Temperature dependent measurements from 80 K to 300 K show monotonous decrease in energy and increase in linewidth up to 200 K at which point discontinuities appear across all analyzed modes. However, this anomaly overcomes the scope of this research and remains an open question.

Crystal structure and phase transitions in InSiTe_3

T. Belojica^a, A. Milosavljević^a, S. Đurđić Mijin^a, A. Šolajić^a, J. Pešić^a, B. Višić^a, Yu Liu^b, C. Petrovic^b, Z. V. Popović^{a,c} and N. Lazarević^a

^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, NY 11973-5000, USA

^cSerbian Academy of Sciences and Arts, Knez Mihailova 35, 11000 Belgrade, Serbia

Abstract. Although first report of InSiTe_3 single crystal synthesis and its structure dates nearly 30 years ago, only a few studies are available up till today. Unlike its related compounds (CrSiTe_3 , CrGeTe_3) which have been intensively studied, and their high and low temperature physical properties are well established, only resistivity and thermal conductivity, as well as theoretical predictions of thermodynamical and mechanical stability of InSiTe_3 were investigated. Probably, one of the main issues causing lack of research data is the proper determination of InSiTe_3 crystal structure, since the literature predicts three different space groups for this material, $P3$, $P\bar{3}$, and $P\bar{3}1m$.

In order to properly investigate InSiTe_3 crystal structure we employed inelastic light scattering technique, and DFT calculations for all suggested crystal structures. Six out of eight and seven out of ten Raman active modes for proposed $P\bar{3}1m$ and $P\bar{3}$ space groups, respectively, are observed and assigned, in agreement with numerical calculations. The theoretical calculations for $P3$ crystal structure are in a strong discrepancy with theoretical results, hence this proposed space group can be neglected. The obtained results suggest the coexistence of two trigonal crystal phases, high symmetry one, $P\bar{3}1m$ and low symmetry $P\bar{3}$ space group. Additionally, to the modes that are theoretically predicted, at around 500 cm^{-1} the A_{1g}/A_g “splitting” mode is detected. The appearance of this peak might be a consequence of local symmetry breaking due to a small difference in lattice parameters of both crystal phases. The temperature dependence of energies and linewidths of the most prominent Raman active modes show a monotonous decrease in energy and increase in linewidth when the material is heated from 80 K. At around 200 K discontinuities in phonon properties can be observed. Above the same temperature, additional features in Raman spectra between 175 and 300 cm^{-1} only in parallel scattering configuration are present, and may be a consequence of two-phonon processes. The phonon temperature dependence and these additional excitations indicate the presence of some kind of phase transition above 200 K. Due to the lack of theoretical and experimental studies the origin and type of this transition remains an open question and requires further analysis.

7-1

Crystal structure of InSiTe_3 studied by Raman spectroscopy

Ana Milosavljević¹, Sanja Đurđić¹, Tea Belojica¹, Andrijana Šolajić¹, Jelena Pešić¹, Bojana Višić¹, Yu Liu², Cedomir Petrović², Zoran V. Popović^{1,3}, Nenad Lazarević¹

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, NY 11973-5000, USA, ³Serbian Academy of Sciences and Arts, Knez Mihailova 35, 11000 Belgrade, Serbia

Even though the first report of InSiTe_3 single crystal synthesis and its structure dates from about 30 years ago, unlike its related compounds (CrSiTe_3 , CrGeTe_3), there has been only a few studies available. One of the reasons behind the lack of research data is the fact that its crystal structure is not unambiguously determined. Raman scattering study of InSiTe_3 reveals presence of six ($3A_{1g} + 3E_g$) out of eight and seven ($5A_g + 2E_g$) out of ten Raman active modes for proposed $P\bar{3}1m$ and $P\bar{3}$ space groups, respectively. These results suggest the coexistence of two trigonal crystal phases, high symmetry one, $P\bar{3}1m$ and a lower symmetry one, which corresponds to $P\bar{3}$ space group. The theoretical predictions obtained by DFT calculations for both space group support this scenario. In addition to the symmetry predicted modes, at around 500 cm^{-1} a mode ascribed to the A_{1g}/A_g mode „splitting“ is detected. The emergence of additional peak could be a consequence of local symmetry breaking due to a small difference in lattice parameters of both crystal phases. The temperature dependence of energies and linewidths of most prominent Raman active modes is also presented in the temperature range from 80 to 300 K. Monotonous decrease in energy and increase in linewidth is present upon heating up to 200 K. Around this temperature discontinuities in properties of all analyzed modes are detected. Yet, due to lack of theoretical and experimental studies of this material this anomaly still remains an open question.