

ПРЕГЛЕД НАУЧНО ИСТРАЖИВАЧКИХ АКТИВНОСТИ

Научно истраживачка активност др Мирјане Грујић-Бројчин везана је за истраживања у области физике чврстог стања након избора у звање виши научни сарадник (2009. године) одвијала се у три (3) истраживачка праваца:

- Карактеризација наноструктурних материјала - моделовање оптичких спектра оксидних нанопорова
- Моделовање оптичких и порозних својстава наноструктурних оксида за фотокаталитичке примене
- Археометрија - примена метода оптичке спектроскопије у изучавању и заштити објеката културног наслеђа

Од претходног избора у звање др Мирјана Грујић-Бројчин објавила је 30 научних публикација, од чега 18 међународних радова са ISI листе и једну научну монографију националног значаја (M41). Одржала је 3 предавања по позиву. Кратка анализа радова које је публиковала у овом периоду дата је у наставку:

Карактеризација наноструктурних материјала - моделовање оптичких спектра оксидних нанопорова

Др Мирјана Грујић-Бројчин активно учествује у истраживању наноструктурних материјала, посебно у развоју и примени нумеричких модела за анализу ИЦ и Раманових, као и моделовању фотолуминесцентних (ФЛ) спектра, који омогућавају систематско проучавање структурних и електронских особина великог броја различитих наноматеријала, са циљем да се потпуније разуме како услови синтезе наноматеријала утичу на жељене карактеристике и потенцијалну примену. Др Мирјана Грујић-Бројчин у континуитету развија нумеричке моделе и кодове, који су до сада успешно примењени на широку класу наноструктурних материјала (нанопорова, квантне тачке, квантне жице, танке слојеве и вишеслојне структуре). Од претходног избора у звање, др Мирјана Грујић-Бројчин је успешно развила и унапредила низ нумеричких модела и одговарајућих софтверских процедура за проучавање чистих и допираних TiO_2 наноструктура, ZnO нанопорова, као и ZnSe нанослојева.

Карактеризација чистих и допираних TiO_2 нанопорова синтетисаних сол-гел методом

- i* M. J. Šćepanović, M. Grujić-Brojčin, Z. D. Dohčević-Mitrović, Z. V. Popović
Characterization of Anatase TiO_2 Nanopowder by Variable-Temperature Raman Spectroscopy
Science of Sintering, 41 (2009) 67-73

- ii M. Šćepanović, S. Aškrabić, M. Grujić-Brojčin, A. Golubović, Z. Dohčević-Mitrović, A. Kremenović and Z.V. Popović
Low-Frequency Raman Spectroscopy of Pure and La-Doped TiO₂ Nanopowders Synthesized by Sol-Gel Method
Acta Physica Polonica A 116 (1) (2009) 94-102

Кандидаткиња је применом методе фоноског ограничења (МФО) спровела детаљну анализу понашања најинтензивнијег Рамановог E_g мода анатас фазе у наноправовима TiO₂, синтетисаним сол-гел методом. Понашање E_g мода последица је утицаја фоноског ограничења, услед нанометарских димензија кристалита (11-15 nm), али и присуства брукитне фазе у узорцима. Ова метода карактеризације омогућила је елементарну идентификацију фаза и процену величине нанокристалита и садржаја брукитне фазе у узорцима у зависности од параметара синтезе, чиме се дошло до оптимизације параметара процеса синтезе, као што су рН вредност средине приликом превођења у гел, трајање „старења” гела, температура, брзина и време калцинације. Код допираних узорака установљено је да су фреквентни померај и ширење E_g Раман мода последица не само нанодимензија кристалита анатаса, већ и неуређености индуковане присуством брукитне фазе и La допанта у узорцима анатас наноправова допираних лантановим јонима (La³⁺) у осегу од 0 до 6 wt.%, такође синтетисаних сол-гел методом. Ово је потврдило да допирање TiO₂ La³⁺ јонима побољшава фазну и наноструктурну стабилност TiO₂ правова на високим температурама, те повећава ефикасност конверзије светлости, као и повећање и стабилизацију температуре фазног прелаза анатас-рутил. Извршено је поређење модела МФО и модела еластичног континуума који описује акустичке фононске модове регистроване у ниско-фреквентном опсегу (<40 cm⁻¹), који се такође може користити за одређивање величине наночестица у наноправовима.

Карактеризација анатас наноправова допираних ванадијумом

M. Šćepanović, S. Aškrabić, M. Grujić-Brojčin, A. Golubović, Z. Dohčević-Mitrović, B. Matović and Z.V. Popović
Raman study of vanadium-doped titania nanopowders synthesized by sol-gel method
International Journal Of Modern Physics B 24(6-7) (2010) 667-675

Др Мирјана Грујић-Бројчин проучавала је наноправове TiO₂ произведене сол-гел синтезом (чисте и допиране ванадијумом) где је испитиван утицај услова температуре и трајања процеса калцинације на њихове структурне варијације. Применом Раманове спектроскопије установљен је велики утицај температуре и трајања процеса калцинације на понашање најинтензивнијег Рамановог E_g мода, док се код недопираних узорака показало да овог утицаја скоро и да нема.

Примена спектроскопске елипсометрије у карактеризацији анатас наноправова

M. Šćepanović, M. Grujić-Brojčin, M. Mirić, Z. Dohčević-Mitrović and Z.V. Popović
Optical Characterization of Laser-Synthesized Anatase TiO₂ Nanopowders by Spectroscopic Ellipsometry and Photoluminescence Measurements
Acta Physica Polonica A 116 (4) (2009) 603-606

Карактеризација наноправова методом спектроскопске елипсометрије, као и нумеричко моделовање експерименталних резултата били су предмет истраживања др Мирјане Грујић Бројчин. Кандидаткиња је применом спектроскопске елипсометрије одређивала

диелектричну функцију ласерски синтетисаних TiO_2 нанопрахова у енергетском опсегу од 1,5 до 6 eV на собној температури. Усаглашавањем другог извода експериментално добијених спектра са одговарајућим аналитичким обликом ових функција, одређене су енергије које одговарају различитим међузонским електронским прелазима у анатас TiO_2 нанопраховима и установљено да се енергија која се може приписати индиректном прелазу између валентне и проводне зоне повећава са смањењем величине кристалита.

Модификација методе фононоског ограничења за друге структуре титанијум диоксида

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

Модел фононоског ограничења модификован је за примену код нанокристалних агрегата TiO_2 допираних гвожђем, где је разматран утицај допирања гвожђем на појаву три фаза TiO_2 у различитим узорцима. Др Грујић-Бројчин је модификовала и применила МФО на анатас и рутил (3D МФО на сферне наночестице анатаса и 2D МФО на наножице рутила), показавши да се повезивањем резултата Раманове спектроскопије и XRPD може остварити квалитетан увид у морфологију и хетерогеност нанокристалних агрегата TiO_2 богатих брукитом, са малим количинама анатаса и рутила, чија појава је корелисана са концентрацијом допанта Fe.

Прегледни радови из области оптичке карактеризације оксидних нанопрахова

- i M. Grujić-Brojcin, M.J. Šćepanović, Z.D. Dohčević-Mitrović and Z.V. Popović
Use of Phonon Confinement Model in Simulation of Raman Spectra of Nanostructured Materials
Acta Physica Polonica A Vol. 116(1) (2009) 51-54
- ii Z.V. Popović, Z. Dohčević-Mitrović, M. Šćepanović, M. Grujić-Brojcin and S. Aškrabić
Raman scattering on nanomaterials and nanostructures
Annalen Der Physik 523(1-2) (2011) 62-74
- iii Maja Šćepanović, Mirjana Grujić-Brojcin, Zorana Dohčević-Mitrović, and Zoran V. Popović
Investigation of vibrational and electronic properties of oxide nanopowders by spectroscopic methods
Journal of Physics: Conference Series 253 (2010) 012015

Захваљујући познавању великог броја експерименталних техника и нумеричких модела за анализу резултата добијених њиховом применом, као и теоријском изучавању оптичких карактеристика великог броја оксидних нанопрахова, др Мирјана Грујић-Бројчин је дала значајан допринос у обједињавању сазнања о утицају метода синтезе на оптичка својства оксидних нанопрахова, посебно чистог и допираног анатаса. Објављена су 3 прегледна рада у међународним часописима, од којих 2 по позиву, у којима се детаљно описују различити аспекти примене МФО на Раманове спектре оксидних нанопрахова.

Монографија националног значаја

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

На основу вишегодишњих истраживања оптичких својстава оксидних нанопрахова, као и докторске дисертације др Мирјане Грујић Бројчин, настала је и монографија "Оптичка својства наноматеријала", чији је коаутор и др Грујић-Бројчин. У овој монографији сажете су технике оптичке карактеризације и нумеричког моделовања, са детаљном разрадом методологије и веома едукативним и илустративним резултатима. Раманова и фотолуминесцентна спектроскопија, инфрацрвена спектроскопија и спектроскопска елипсометрија и њихове примене у карактеризацији чистих и допираних TiO_2 и CeO_2 нанопрахова, као и механички активираних ZnO нанопрахова, разматране су у корелацији са резултатима добијеним другим методама, као што су XRD, SEM, AFM, TEM, BET итд.

Моделовање оптичких и порозних својстава чистог и допираног CeO_2

Z. V. Popović, M. Grujić-Brojčin, N. Paunović, M. M. Radonjić, V.D. Araújo, M. I. B. Bernardi, M. M. de Lima, A. Cantarero
Far-infrared spectroscopic study of CeO_2 nanocrystals
Journal of Nanoparticle Research 17(1) (2015) 1-7

У овом раду др Грујић-Бројчин применила је своје вишегодишње искуство у моделовању инфрацрвених спектра оксидних нанопрахова методама ефективне средине (Brugemann-ов и генерализовани Brugemann-ов модел, који укључује параметре порозности материјала). Спектри порозних нанопрахова CeO_2 (чистих и допираних бакром) моделирани овим методама, како би се установио утицај концентрације допанта на оптичке фононе и њихову густину стања. Ово је, колико је нама познато, први рад у коме се детаљно и систематично третирају инфрацрвени спектри CeO_2 нанопрахова методама ефективне средине.

Карактеризација ZnO нанопрахова: модификација МФО и резонантно Раманово расејање

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

Др Мирјана Грујић-Бројчин је дала значајан допринос анализи активираних прахова и синтерованих керамика ZnO , како би се испитале врсте сопствених дефеката и примеса уведених током процеса механичке активације. Раманова спектроскопија примењена је за истраживање структурних и стехиометријских промена код активираних ZnO прахова у зависности од времена активације и избора апаратуре. На основу нумеричких симулација, редshift и ширење Раманових модова првог реда E_2^{high} и $E_1(\text{LO})$, карактеристичних за ZnO , код активираних прахова приписани је повећаној неуређености проузрокованој механичким млевењем, праћеном смањењем корелационе

дужине. Овакво понашање успешно је проучено применом модификоване МФО (укључен је ефекат анизотропије Brillouin-ове зоне). Тако процењена промена концентрације дефеката уз познавање односа карактеристичних модова $E_1(\text{LO}) / E_2^{\text{high}}$, указала је на кисеоничне ваканције као доминантне дефекте. Додатни Раман модови на ~ 510 и 550 cm^{-1} у спектрима активираних прахова приписани су вибрацијама површинских оптичких фонона, које се јављају на границама зрна између ултрафиних нанокристалиста и неуређене области у ZnO нанокристалистима. Кандидаткиња је ове модове успешно моделовала преко диелектричне функције и порозних својстава активираних прахова услед присуства ваканција, што је указало на повећање концентрације дефеката са временом активације у вибро-млину. Повећање времена активације у планетарном млину довело је до извесне релаксације у праховима, праћене смањењем концентрације сопствених дефеката, али и појавом уведених дефеката услед контаминације у цирконијумским посудама за млевење.

Утицај неуређености на оптичка и електронска својства активираних ZnO испитиван је применом фотолуминесцентне спектроскопије и спектроскопске елипсометрије. Предложена је измењена интерпретација резонантног појачања Рамановог расејања првог и другог реда у високонеуређеним ZnO наноправима. Детаљна анализа резонантног Рамановог ефекта у ZnO изазваног ласерским зрачењем енергије мање од енергетског процепца дала је значајне информације о електронским стањима унутар енергетског процепца ZnO наноправова. Уочено је систематска зависност јачине електрон-фонон спаривања од корелационе дужине која зависи од неуређености кристалне решетке ZnO.

Карактеризација ZnSe нанослојева применом спектроскопске елипсометрије

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

У оквиру ових истраживања др Мирјана Грујић-Бројчин бавила се моделовањем елипсометријских спектра ZnSe нанослојева. Показанала је да се може постићи добро слагање експерименталних и моделованих елипсометријских спектра када се ZnSe нанослојеви третирају као поликристални материјал моделован као смеша порозног кристалног ZnSe и аморфног ZnSe, применом Bruggeman-овог модела ефективне средине. Показано је да СЕ може дати веома корисне информације о кристаличности и наноструктури полупроводничких танких слојева. Резултати добијени применом спектроскопске елипсометрије указали су на повећање удела аморфне фазе при смањењу дебљине ZnSe слоја, што је било у доброј сагласности са резултатима добијеним применом АФМ, Рамановог расејања и оптичке трансмисије.

Моделовање оптичких и порозних својстава наноструктурних оксида за фотокаталитичке примене

У опсежним истраживањима различитих оксидних наноправова, синтетисаних сол-гел и хидротермалном методом са циљем да се варијацијом параметара синтезе добију фотокатализатори ефикасни у деградацији органских загађивача (као што су фармацеутска једињења, метопролол и аплазолом, разни пестициди, хербициди и органске боје), кандидаткиња је узела учешће у експериментима Раманове и

фотолуминесцентне спектроскопије, као и нумеричком моделовању експерименталних спектра. Посебно, др Мирјана Грујић-Бројчин је развила и унапредила моделовање порозних својстава нанопрахова, што се показало као есенцијално при корелисању морфолошких својстава нанопрахва са њиховом фотокаталитичком активношћу. На тај начин су варијацијом и правилним избором одговарајућих параметара синтезе добијени нанопрахови упоредиви или бољи од комерцијалног фотокатализатора Degussa P25.

Моделовање оптичких и порозних својстава наноструктурних оксида за фотокаталитичке примене

- i* A. Golubović, N. Tomić, N. Finčur, B. Abramović, I. Veljković, J. Zdravković, M. Grujić-Brojčin, B. Babić, B. Stojadinović, M. Šćepanović
Synthesis of pure and La-doped anatase nanopowders by sol–gel and hydrothermal methods and their efficiency in photocatalytic degradation of alprazolam
Ceramics International 40(8) (2014) 13409-13418
- ii* Grujić-Brojčin, M., Armaković, S., Tomić, N., Abramović, B., Golubović, A., Stojadinović, B., Kremenović, A., Babić, B., Dohčević-Mitrović, Z., Šćepanović, M.
Surface modification of sol-gel synthesized TiO₂ nanoparticles induced by La-doping
Materials Characterization 88 (2014) 30-41.
- iii* A. Golubović, B. Abramović, M. Šćepanović, M. Grujić-Brojčin, S. Armaković, I. Veljković, B. Babić, Z. Dohčević-Mitrović, and Z. V. Popović
Improved efficiency of sol-gel synthesized mesoporous anatase nanopowders in photocatalytic degradation of metoprolol
Materials Research Bulletin 48 (4) (2013) 1363-1371.
- iv* M. Šćepanović, B. Abramović, A. Golubović, S. Kler, M. Grujić-Brojčin, Z. Dohčević-Mitrović, B. Babić, B. Matović, Z. V. Popović
"Photocatalytic degradation of metoprolol in water suspension of TiO₂ nanopowders prepared using sol–gel route"
Journal of Sol-Gel Science and Technology 61 (2012) 390–402
- v* A. Golubović, I. Veljković, M. Šćepanović, M. Grujić-Brojčin, N. Tomić, D. Mijin, B. Babić
Influence of some sol-gel synthesis parameters of mesoporous TiO₂ on photocatalytic degradation of pollutants
Chemical Industry and Chemical Engineering Quarterly OnLine-First Issue 00 (2015) 20-20
- vi* A. Golubović, B. Simović, M. Šćepanović, D. Mijin, A. Matković, M. Grujić-Brojčin, B. Babić
Synthesis of anatase nanopowders by sol-gel method and influence of temperatures of calcination to their photocatalytic properties
Science of Sintering 47(1) (2015) 41-49

Др Мирјана Грујић-Бројчин је дала значајан допринос успешној примени Раманове спектроскопије за карактеризацију чистих и допираних нанопрахова титанијум диоксида синтетисаних сол-гел и хидротермалном методом, намењених за фотокаталитичку разградњу органских загађивача. Из резултата мерења Рамановог расејања одређене су доминантне фазе у синтетисаним нанопраховима, док су димензије и напрезања у анатас нанокристалима процењене применом МФО на измерене Раман спектре. Ови експериментални резултати су показали да су сви синтетисани TiO₂ узорци нанокристални, са доминантном анатас фазом и малим садржајем брукита. Раманова спектроскопија такође је коришћена за детектовање и одређивање специфичних површинских група (CH, OH групе) значајних за процес фотокатализе, упркос томе што

се у том спектралном региону јавља интензивна фотолуминесценција. Запажено је да је мод на $\sim 3700\text{ cm}^{-1}$, приписан вибрацијама слободних хидроксилних група активних у процесу фотокатализе, присутан код чистих и узорака допираних лантаном који показују највећу фотокаталитичку активност.

Утицај допирања на енергетски процеп и енергије електронских прелаза др Мирјана Грујић-Бројчин испитивала је применом спектроскопске елипсометрије. Анализа резултата показала је постојање директног електронског прелаза у свим синтетисаним TiO_2 наноправима, као и да ширина директног енергетског процепа у правима допираним лантаном расте са повећањем концентрације La допанта у TiO_2 због присуства лантановог оксида La_2O_3 . За потребе ове анализе др Мирјана Грујић-Бројчин развила је оригинални софтвер.

Посебно значајан допринос др Мирјане Грујић-Бројчин представљају анализе резултата мерења порозности наноправов титанијум диоксида. Осим BET и ВЈН методе, које су уобичајене у анализи порозности, др Грујић-Бројчин је порозне структуре синтетисаних правова анализирала применом CPS (*Corrugated pore structure*) модела, за који је креирала нумерички модел и развила одговарајући оригинални софтвер. На основу CPSM процењиван је тзв. фактор "вијугавости" (*tortuosity factor*), који даје информације о повезаности пора, односно описује транспортну динамику порозне средине, чиме посредно одређује време фотокаталитичке реакције, веома значајан параметар у анализи фотокаталитичке активности порозних материјала. Треба напоменути да се овај модел и софтвер, који се успешно користе за моделовање порозних својстава наноправов титанијум диоксида, могу користити и за друге порозне материјале.

На основу ових резултата, побољшана фотокаталитичка својства чистих и допираних TiO_2 наноправов приписана су мањој димензији наночестица, већој специфичној површини и запремини пора, као и већој комплексности порозне структуре. Присуство изолованих (слободних) хидроксилних група као изузетно активних позиција у материјалу, регистровано је у TiO_2 наноправима са ниским садржајем La, који показују највећу активност у деградацији метопролола. У овој студији такође је показано да применом методе спектроскопске елипсометрије може бити одређена врста електронског прелаза у TiO_2 . Анализа ових резултата показује постепени раст енергетског процепа са допирањем, што може бити приписано модификацији површине наночестица TiO_2 , што је и потврђено STM-STS мерењима.

Крактеризација наноправов брукита синтетисаних хидротермалном методом

- i* N. Tomić, M. Grujić-Brojčin, N. Finčur, B. Abramović, B. Simović, J. Krstić, B. Matović, M. Šćepanović
Photocatalytic degradation of alprazolam in water suspension of brookite type TiO_2 nanopowders prepared using hydrothermal route
Materials Chemistry and Physics 163 (2015) 518-528

Нова истраживања започета су током 2013. године, са циљем да се нанопрах брукита, најређе и најмање синтетисане и испитиване модификације титанијум диоксида, синтетише релативно једноставном методом као што је хидротермална синтеза, те да се контролом и пажљивим избором параметара синтезе добију наноправов одређених карактеристика, који би својом ефикасношћу могли да конкуришу другим двома модификацијама TiO_2 , као и комерцијалним TiO_2 фотокатализаторима.

Карактеризација TiO_2/WO_3 превлака синтетисаних плазма електролитичком оксидацијом

D. Marinčev, M. Grujić-Brojčin, S. Stevanović, M. Radović, M. Šćepanović, Z.D. Dohčević-Mitrović

The Raman spectroscopy of TiO_2/WO_3 coatings formed by plasma electrolytic oxidation

2nd Conference of The Serbian Ceramic Society, Programme and the book of abstracts 2CSCS-2013. June 5-7. 2013, Belgrade Serbia

Др Грујић-Бројчин је као ментор докторских студија мр Данијеле Маринчев, заједно са кандидаткињом започела проучавање титанијум диоксидних превлака TiO_2/WO_3 у анатас фази. Методама Раманове и фотолуминесцентне спектроскопије и спектроскопске елипсометрије, у оквиру истраживања оксидних превлака за фотокаталитичке примене, детаљно се разматрају фононска и електронска структура ових превлака, са циљем да се установи какав утицај имају структура превлака и учешће волфрам триоксида у фотокаталитичкој деградацији органских загађивача (пре свега фармацеутских једињења метопролола и алпрозолама).

Предавање по позиву из области оптичке карактеризације оксидних нанопорова

M. Grujić-Brojčin, M. Šćepanović, Z.V. Popović

Numerical Models in Analysis of Morphological Properties of Oxide Nanopowders

SFKM, The 19th Symposium on Condensed Matter Physics, November 09-11, 2015,

Belgrade, Book of Abstracts p.2

Др Грујић-Бројчин ове године је одржала предавање по позиву у коме је представљен преглед нумеричких симулација које су развијене и коришћене за моделовање оптичких и порозних својстава оксидних нанопорова, са акцентом на примену ових метода у дизајну наноматеријала са специфичним својствима за практичне примене у фотокаталитичкој деградацији органских загађивача (фармацеутски, пестициди, хербициди).

Примена метода оптичке спектроскопије у заштити културних добара

Др Мирјана Грујић-Бројчин започела је 2013 активности у новој научној области - Археометрији. Археометрија је научна дисциплина која се бави испитивањем и тумачењем својстава објеката културног наслеђа (археолошких материјала и уметничких дела) методама и техникама природних и техничких наука. У оквиру ове активности, др Грујић-Бројчин применила је методе оптичке спектроскопије у области проучавања и заштите културних добара, посебно пигмената и бојених површина и археолошких керамика. Методе Раманове, инфрацрвене и фотолуминесцентне спектроскопије др Грујић-Бројчин користила је у испитивању археолошких керамика са циљем да се добију прецизније информације о тзв. *историји материјала* (саставу и пореклу сировине,

технологији производње и обраде, температури печења и слично) и у корелацији са резултатима примене других метода експерименталне физике дође до сазнања која су неопходна за исправно тумачење артефаката у археолошким истраживањима.

Примена Раманове спектроскопије за проучавање културног наслеђа

- i M. Grujić-Brojčin, M. Šćepanović
THE APPLICATION OF RAMAN SPECTROSCOPY IN THE ANALYSIS OF ANCIENT CERAMICS
3CSSCS-2015, 3rd Conference of The Serbian Society for Ceramic Materials, June 15-17, 2015, Belgrade, Book of Abstracts, p. 49
- ii M. Grujić-Brojčin, D. Rogić, M. Gajić-Kvašćev, M. Šćepanović
The Application of Raman Spectroscopy in Cultural Heritage: A Preliminary Study of Blue Pigments from Fresco Painted Tomb from Sirmium
AIS3 - Italian - Serbian Bilateral Workshop on "Science for Cultural heritage", Eds. P Batinelli, J. Striber, November 12, 2013, Museum of Yugoslav History, Belgrade, pp. 111-116
- iii M. Grujić-Brojčin, I. Vranić, M. Gajić-Kvašćev, M. Šćepanović
Primena Ramanove spektroskopije za proučavanje kulturnog nasleđa: prvi rezultati ispitivanja keramike sa lokaliteta Kale-Krševica
LANTERNA - Nuklearne i druge analitičke tehnike u izučavanju kulturnog nasledja - zaštita baštine između prirodnih i društvenih naučnih oblasti - I nacionalni skup, 3 Novembar 2014., Novi Sad, Knjiga apstrakata, p.16

Др Мирјана Грујић-Бројчин је у сарадњи са колегама из Института за нуклеарне науке Винча 2013. године започела испитивање плавих пигмената са античких фресака пронађених у гробовима на локалитету Сирмиум, Сремска Митровица. Од 2013. године кандидаткиња се такође бавила испитивањем археолошких керамика из IV-III века п.н.е. са налазишта Кале Кршевица (Србија) у сарадњи са Институтом за нуклеарне науке Винча и Институтом за археологију САНУ, са циљем да се применом Раманове спектроскопије установи састав керемичких узорака и изврши раздвајање по пореклу (локално произведене и импортне керамике). У оквиру билатералног пројекта "Scientific and technological cooperation between Sapienza University of Rome and University of Belgrade in the area of Cultural Heritage" (који је Институт за физику потписао са Универзитетом Сапиенца у Риму за период 2013-2015. и 2016-2018.), Др Мирјана Грујић-Бројчин бави се координацијом пројектних активности и руководи применом Раманове спектроскопије у испитивању карактеристика исламске керамике из XI века нове ере са налазишта краљевске палате султана Ghaznavide Mas'uda III, локалитет Ghazni, Авганистан, са циљем одређивања састава керемичких узорака, који су произведени по узору на познате "Изник" керамике.

У оквиру ове области, кандидаткиња је одржала неколико предавања по позиву објављених у изводу или у целини.

Такође, 2 публикације из ове области прихваћене су за објављивање (од којих једна у водећем националном тематском зборнику):

- i M. Grujić-Brojčin I. Vranić, M. Gajić-Kvašćev, M. Šćepanović, V. Krstić
Arheološki lokalitet „Kale“ u Krševici: preliminarno istraživanje porekla i tehnologije izrade keramičkog materijala primenom ramanove i XRF spektroskopije
Tematski zbornik LANTERNA 2014 (ISBN 978-86-7306-132-0, ISBN 9788683603893)
Institut za nuklearne nauke Vinča i Galerija Matice srpske, pp. P1-P15.

- M. Grujić-Brojčin, Maja Šćepanović, A.C. Felici, and Maja Gajić-Kvašček
- ii* The Identification of Titania Polymorphs in Different Samples of Cultural Heritage by Raman Spectroscopy
AIS3 - Italian - Serbian Cooperation on Science, Technology and Humanities, Belgrade, Nov 16, 2015.

Елементи за квалитативну оцену научног доприноса кандидата др Мирјане Грујић-Бројчин

1. Показатељи успеха у научном раду

1.1. Награде и признања за научни рад

Пре претходног избора у звање

Награда за најбољу постер презентацију на међународној конференцији European Materials Research Society, Symposium A: Raman scattering in Materials Science, одржаној у Варшави 15-19 септембра 2008, за рад „*Use of Phonon Confinement Model in Simulation of Raman Spectra of Nanostructured Materials*“, аутора М. Grujić-Brojčin et al.

Рад под насловом: Temperature-dependent Raman study of $\text{Ce}_{0.75}\text{Nd}_{0.25}\text{O}_{2-\delta}$ nanocrystals, на коме је др Грујић-Бројчин један од коаутора, публикован у једном од наутицајнијих часописа из физике чврстог стања - *Applied Physics Letters* 91 (2007) 203118, од стране Америчког Института за физику и Америчког Физичког Друштва изабран је као један од тридесет радова из граничних истраживања у области нанонауке и нанотехнологије публикованих у америчким часописима највеће међународне репутације током 2007. године.

1.2. Уводна предавања на конференцијама и друга предавања по позиву

Након избора у звање

Аутор је 1 предавања по позиву на националном скупу и коаутор 2 предавања по позиву на међународним конференцијама из области примене спектроскопских метода у проучавању наноматеријала публиковане у целини:

1. M. Grujić-Brojčin, M. Šćepanović, Z.V. Popović
Numerical Models in Analysis of Morphological Properties of Oxide Nanopowders
SFKM, The 19th Symposium on Condensed Matter Physics, November 09-11, 2015,
Belgrade, Book of Abstracts p.20
2. Z.V. Popović, Z. Dohčević-Mitrović, M. Šćepanović, M. Grujić-Brojčin and S. Aškrabić
"Raman scattering on nanomaterials and nanostructures", "Optical and Vibrational Spectroscopies" Symposium a tribute to Manuel Cardona, August 18-20, Queretaro Mexico
3. Maja Šćepanović, Mirjana Grujić-Brojčin, Zorana Dohčević-Mitrović, and Zoran V. Popović
Investigation of vibrational and electronic properties of oxide nanopowders by spectroscopic methods
Journal of Physics: Conference Series 253 (2010) 012015

Аутор је 2 предавања по позиву (једно на међународном и једно на националном скупу) из области примене метода експерименталне физике у проучавању и заштити културног наслеђа:

- 4 M. Grujić-Brojčin, M. Šćepanović
THE APPLICATION OF RAMAN SPECTROSCOPY IN THE ANALYSIS OF ANCIENT CERAMICS
3CSSCS-2015, 3rd Conference of The Serbian Society for Ceramic Materials, June 15-17, 2015, Belgrade, Book of Abstracts, p. 49
- 5 M. Grujić-Brojčin, I. Vranić, M. Gajić-Kvašćev, M. Šćepanović
Primena Ramanove spektroskopije za proučavanje kulturnog nasleđa: prvi rezultati ispitivanja keramike sa lokaliteta Kale-Krševica
LANTERNA - Nuklearne i druge analitičke tehnike u izučavanju kulturnog nasleđa - zaštita baštine između prirodnih i društvenih naučnih oblasti - I nacionalni skup, 3 Novembar 2014., Novi Sad, Knjiga apstrakata, p.16

ПРИЛОГ: Позивна писма и/или списак предавача по позиву.

Пре претходног избора у звање

Коаутор је 2 пленарна предавања на скуповима међународног значаја и 4 предавања по позиву, од којих 2 на скуповима међународног значаја.

Предавање по позиву са међународног скупа објављено у целини

- 6 Z. V. Popović, Z. Dohčević-Mitrović, M. Šćepanović and M. Grujić-Brojčin
Nanopowders characterization using the vibrational spectroscopy methods, Proc. 1st International Workshop on Nanoscience & Nanotechnology IWON 2005, Belgrade, Serbia and Montenegro, pp. 88-93 (2005)
- 7 M. J. Šćepanović, M. Grujić-Brojčin, Z. Dohčević-Mitrović, Z. Popović, *Vibrational spectroscopy methods in the characterization of nanostructured materials*, 14th ISCMP, Advances in physics and technology of solids and soft condensed matter, Varna (2006)
- 8 Z. V. Popović, Z. Dohčević-Mitrović, M. Šćepanović and M. Grujić-Brojčin, *Nanopowders Characterization using the Optical spectroscopy methods*, 11th International ceramic Congress-CIMTEC (2006), Acireale, Sicily, Italy

Предавање по позиву са међународног скупа објављено у изводу

- 9 Z. V. Popović, Z. Dohčević-Mitrović, M. Šćepanović and M. Grujić-Brojčin
Characterization of nanopowders using optical methods
6th International Conference of the Balkan Physical Union-BPU, Istanbul, Turkey, August 22-26, 2006, Book of Abstracts p.50

Предавање по позиву са скупа националног значаја објављено у целини

- 10 Z. D. Dohčević-Mitrović, M. Šćepanović, I. Hinić, M. Grujić-Brojčin, G. Stanišić and Z. V. Popović, *Raman and infrared study of nanostructured materials*, XVI National Symposium on Condensed Matter Physics SFKM 2004, Sokobanja, Serbia and Montenegro, Program and Contributed Papers, 78-85 (2004)
- 11 M. Šćepanović, Z. D. Dohčević-Mitrović, M. Grujić-Brojčin and Z. V. Popović, *Vibrational Spectroscopy Methods as a Powerful Tool for Nanomaterials Characterization*, XII Symposium on Condensed Matter Physics – SFKM 07, Vršac – Serbia, Program and Contributing Papers pp. 18-25

1.3. Чланства у уређивачким одборима часописа, уређивање монографија, рецензије научних радова и пројеката

Након претходног избора у звање др Мирјана Грујић-Бројчин била је рецензент у више међународних часописа, међу којима су:

Journal of Optics
Processing and Application of Ceramics
Materials Science and Engineering B
physica status solidi
Materials Chemistry and Physics

ПРИЛОГ: копије електронске комуникације којима се потврђује учешће у рецензијама међународних радова.

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

2.1. Допринос развоју науке у земљи

После избора у звање

Др Мирјана Грујић-Бројчин је својим активностима и експертизом значајно допринела систематизацији метода за моделовање оптичких и порозних својстава наноматеријала, са циљем успостављања општих принципа обраде експерименталних резултата и јасне корелације између појединих параметара нумеричких модела и реалних карактеристика наноструктурних система.

Захваљујући овим активностима, др Мирјана Грујић-Бројчин је као коаутор 2011. године учествовала у изради научне **монографије** националног значаја "Оптичка својства наноматеријала" (З. Дохчевић-Митровић, М. Шћепановић, М. Грујић-Бројчин, З. В. Поповић). Ова монографија делом је настала из докторске дисертације др Грујић-Бројчин („Оптичка спектроскопија оксидних нанопрахова“ одбрањене 2008. године на Електротехничком факултету Универзитета у Београду), и представља прву публикацију из ове области на српском језику, чиме значајно доприноси систематизацији научне грађе из ове области и образовању младих научника у нашој земљи. Ова монографија даје преглед експерименталних метода оптичке спектроскопије (Раманова, фотолуминесцентна, инфрацрвена спектроскопија, спектроскопска елипсометрија) и њихове примене на различите наноструктурне материјале (оксидне нанопрахе чистих и допираних TiO_2 , CeO_2 , затим механички активирани ZnO нанопрахе итд.), као и бројне методе који се користе за моделовање вибрационих спектра ових материјала.

Својим ангажовањем, Др Мирјана Грујић-Бројчин такође је дала значајан допринос формирању **центра изврности** *Centre of Excellence for Optical Spectroscopy Applications (OPSA) in Physics, Material Science and Environmental Protection*, који је финансиран од стране Европске заједнице у оквиру ФП6 програма (2006- 2009), што је довело и до признавања Центра за физику чврстог стања и нове материјале, Института за физику, као Националног центра изузетних вредности за област нанонауке и нанотехнологије.

Од 2013. године др Грујић-Бројчин бави се **новом истраживачком облашћу**, Археометријом, и у оквиру ње применом метода оптичке спектроскопије (Раманове, фотолуминесцентне и инфрацрвене) у проучавању објеката културног наслеђа. Наиме, систематска примена ових спектроскопских метода за истраживање објеката културног наслеђа и научна анализа добијених резултата представљају нови корак у научним истраживањима ове врсте код нас. Посебан фокус истраживања кандидаткиње представља проучавање керамичких материјала са циљем проналажења археолошки релевантних параметара процеса производње и класификације узорака према начину производње и пореклу.

Пре претходног избора у звање

У оквиру истраживања везаних за докторску тезу, др Мирјана Грујић-Бројчин дала је оригиналан допринос развоју и усавршавању нумеричких модела везане за вибрациону спектроскопију наноструктурних материјала и израдила одговарајуће програмске пакете за њихову примену. Ова истраживања обухватају модел фононске локализације и генералисани модел ефективне средине, који представљају базичне моделе приликом правилне интерпретације Раманових и инфрацрвених спектра наноструктурних материјала. Модел фононске локализације примењени су на широку класу наноструктурних материјала (нанопрахови, квантне жице, танки филмови итд.), обухватајући следеће ефекте: фононску локализацију, дистрибуцију димензија наночестица, микронапрезање, нестехиометрију и анхармонијски ефекат. Генералисани модели ефективне средине коришћени су у анализи ИЦ спектра наноматеријала, са циљем да се одреди утицај запреминског учешћа нанопраха, величине и облика наночестица, односно пора у њему и такође је примениван је на широкој класу порозних нанопрахова и нанокмпозита. Др Мирјана Грујић-Бројчин такође је радила је на моделима који омогућавају раздвајање учешћа различитих фотолуминесцентних механизма, повезаних са радијативном рекомбинацијом посредством одређених локализованих нивоа унутар забрањене зоне у оксидним нанопраховима, са циљем раздвајања утицаја ефеката карактеристичних за оксидне нанопрахе (нестехиометрија (кисеоничне ваканције), површинска стања и самозаробљен екситони).

Усавршавање ових модела представља значајан практични напредак у проучавању структурних, оптичких и електронских особина нанокристалних материјала. Систематизација и анализа експерименталних резултата доприносе формирању потпуније слике о наноструктурним материјалима и дају значајан допринос разумевању утицаја услова синтезе на њихове жељене карактеристике и потенцијалну примену. У оквиру домаћих и међународних пројеката на којима др Грујић-Бројчин учествовала, ови модели и софтвери коришћени су за анализу спектра разноврсних наноструктурних материјала чистих и допираних TiO_2 и CeO_2 нанопрахова, ZnSe-SiO_x мултислојева, $\text{GeS}_2\text{-CdSe}$ мултислојева итд. Овим истраживањима и личним залагањем др Грујић-Бројчин допринела је бољем разумевању својстава нанокристалних материјала.

2.2. Менторство и сарадња при изради мастер, магистарских и докторских радова

Кандидаткиња је учествовала у изради једне магистарске и две докторске тезе. Дала је допринос у развоју модела и софтвера, нумеричкој обради и тумачењу експерименталних резултата добијених применом Раманове спектроскопије:

- 1 Докторска теза др Катарине Војисављевић, под називом "Модификација структуре и својстава цинк-оксида индукована механичком активацијом", одбрањене 2010. године на Институту за мултидисциплинарна истраживања Универзитета у Београду. Из ове тезе проистекла су **3 заједничка рада категорије M21, 1 рад M23 и 1 саопштење M34:**
 - (1) K. Vojisavljević et al. J. Phys.: Condens. Matter **20 (47)** (2008) 475202
 - (2) M. Šćepanović et al. Journal of Applied Physics 109 (2011) 034313
 - (3) M. Šćepanović et al. Journal of Raman Spectroscopy 41 (2010) 914
 - (4) M. Šćepanović et al. Acta Physica Polonica A 112 (2007) 1019
 - (5) K. Vojisavljević et al. 1st Conference of Serbian Ceramics Society 1CSCS 2011, Belgrade
- 2 Докторска теза др Соње Ашкрабић под називом "Фонони и дефектна стања у оксидним наноматеријалима" одбрањене 2014. године на Физичком факултету Универзитета у Београду. Из ове тезе проистекла су **3 заједничка рада категорије M22 и M23 и 2 саопштења M34:**
 - (1) Z.V. Popović et al. Annalen Der Physik 523(1-2) (2011) 62
 - (2) M. Šćepanović et al. Int J of Mod Physics B 24(6-7) (2010) 667
 - (3) M. Šćepanović et al. Acta Physica Polonica A 116 (1) (2009) 94
 - (4) S. Aškrabić et al. 1st International Conference from Nanoparticles & Nanomaterials to Nanodevices & Nanosystems, Halkidiki Greece, 2008
 - (5) M. J. Šćepanović et al. 9th YUCOMAT 07, Herceg Novi, 2007
- 3 Магистарска теза др Марка Радовића, под називом „Структурна и вибрациона својства $Ce_{1-x}A_xO_{2-y}$ ($A=Nd, Gd, Ba$) нанокристала“, одбрањене 2008. године на Физичком факултету Универзитета у Београду. Из ове сарадње објављена су **2 заједничка рада из категорије M21 и M22 и један рад у домаћем часопису M52, као и 4 излагања M34:**
 - (1) Z. D. Dohčević-Mitrović et al., Appl. Phys. Lett. 91 (2007) 203118
 - (2) M. Radović et al. Science of Sintering 39 (2007) 281
 - (3) N. Ž. Lazarević, Hemijska industrija 63 (3) (2009) 221
 - (4) Z. D. Dohčević-Mitrović et al. ICSAM-2007, International conferece on structural analysis of advanced materials 2007 Patras Greece
 - (5) M. Grujić-Brojčin et al. 6th International Conference of the Balkan Physical Union-BPU 2006, Istanbul, Turkey
 - (6) S. Aškrabić et al. 1st International Conference from Nanoparticles & Nanomaterials to Nanodevices & Nanosystems, Halkidiki Greece, 2008
 - (7) Z D. Dohčević-Mitrović et al. 2nd INTERNATIONAL CONGRESS ON CERAMICS, Verona 2008.

Др Грујић-Бројчин је ментор докторских студија кандидаткиње мр Данијеле Маринчев на Физичком факултету Универзитета у Београду, са којом у Центру за физику чврстог стања и нове материјала Института за физику ради на истраживању наноструктура (превлака и нанопрахова) на бази оксида титанијума и волфрама на и до сада има једну заједничку публикацију на међународној конференцији M34 (D. Marinčev, M. Grujić-Brojčin et al. "The Raman spectroscopy of TiO_2/WO_3 coatings formed by plasma electrolytic

oxidation", 2nd Conference of The Serbian Ceramic Society, Programme and the book of abstracts 2CSCS-2013. June 5-7. 2013, Belgrade),

Кандидаткиња је сарађивала у неколико истраживања у којима је за потребе изучавања различитих наноструктура допринела оригиналним софтвером чији је аутор и одговарајућим прилагођењима феноменолошких модела и софтвера за конкретне наноматеријале, затим асистенцијом при извођењу прорачуна, као и у тумачењем дела резултата који су се односили на Раманову спектроскопију наноматеријала, а који су касније коришћени током израде докторских дисертација. Докази о сарадњи дати у прилогу виду **захвалница у међународним радовима са ISI листе (M21, M22):**

- (1) Golubovic et al. 2009 *J. Sol-Gel Sci Technol* 49;
- (2) Lukovic-Golic et al. 2011 *Nanotechnol.* 22
- (3) Scepanovic et al. 2009 *Acta Physica Polonica A* 115
- (4) Zdravkovic et al. 2015 *Ceram. Int.* 41.

ПРИЛОГ: Релевантне странице теза као доказ да је кандидаткиња учествовала у њиховој реализацији, потврда са факултета, потврде шефа пројекта; заједнички радови са кандидатима (прва страна), захвалнице у радовима са ISI листе у којима колеге кандидати потврђују сарадњу (прва и последње стране); одговарајући радови у целини приложени су у библиографији.

2.3. Међународна сарадња

После избора у звање

Др Мирјана Грујић-Бројчин активно учествује у **4 пројекта међународне сарадње:**

- 1 У билатералном пројекту "Scientific and technological cooperation between Sapienza University of Rome and University of Belgrade in the area of Cultural Heritage" Центра за физику чврстог стања и нове материјал Института за физику и Универзитетом Сapiенца у Риму (који је потписан најпре за период 2013-2015, а затим 2016-2018. године), др Мирјана Грујић-Бројчин се веома активно бави применом Раманове спектроскопије у области проучавања и заштите културних добара, односно изучавањем бојених површина и керамика са античких и средњовековних налазишта на са територије Републике Србије и из иностранства.
- 2 Од 2014. године кандидаткиња сарађује и на пројекту билатералне сарадње „Competition between s-wave and d-wave pairing channels and Fe -vacancy ordering in tetragonal β -Fe_{1+x}Se“ са немачким институтом Walther-Meissner из Минхена.
- 3 Кандидаткиња даје значајан допринос континуираној билатералној сарадњи Центра за физику чврстог стања и нове материјале Института за физику и Института за физику чврстог стања Бугарске академије, која се тренутно реализује у оквиру пројекта: "Raman Scattering and Photoluminescence from Semiconductor Nanoparticles".
- 4 Током 2009-2012. године кандидаткиња је активно учествовала на пројекту билатералне сарадње SCOPEs са Институтом за физику полимера Федералног техничког института Цирих (ETH Zurich) из Швајцарске у оквиру ког се бавила Рамановом спектроскопијом нанопорова за фотокаталитичке примене и нумеричким симулацијама Раманових спектра и порозних својстава оксидних нанопорова.

ПРИЛОГ: потврде о учешћу на билатералним пројектима.

Пре избора у претходно звање

- 5 Током 1999. године др Мирјана Грујић-Бројчин провела је неколико месеци на студијском боравку у Москви, у Институту за аналитичку хемију и геохемију „Вернадски“ Руске Академије Наука, у Лабораторији за спектроскопију и молекуларно моделовање, под руководством академика проф. др Лава А. Грибова. На основу ове сарадње кандидаткиња је објавила 4 рада у међународним и 2 у домаћим часописима и одбранила магистарску тезу под насловом „Вибрациона спектроскопија једнослојних угљеничних нанотуба” на Електротехничком факултету Универзитета у Београду, у августу 2000. године.

Након избора у претходно звање кандидаткиња учествује у **4 европска пројекта:**

- 1 2006-2009. године др Мирјана Грујић-Бројчин учествује у међународном пројекту *Centre of Excellence for Optical Spectroscopy Applications (OPSA-026283) in Physics, Material Science and Environmental Protection*, који се финансира од стране Европске заједнице у оквиру **FP6 програма (2006-2009)** и својим радом доприноси успешној реализацији овога пројекта;
- 2 **NANO-ET (FP7-REGPOT-2010-1)** под називом "Research potential reinforcement in the processing of Nano-structured Oxide-Based Materials for Environmental Technologies"
- 3 Учествује у **DAFNEOX** - Designing Advanced Functionalities through controlled NanoElement Integration in Oxide Thin Films” Marie Sklodowska Curie пројекту **H2020-MSCA-RISE-2014**.
- 4 Координатор је иницијативе и пројектног предлога *SciTeCH - European Joint Doctorate in Science and Tecnology for Cultural Heritage*, у оквиру Marie Sklodowska-Curie Actions - Innovative Training Networks (ITN) (позив **H2020-MSCA-ITN-2016**) у коме учествује 16 европских универзитета и неакадемских институција релевантних за област проучавања и конзервације културног наслеђа у Европи.

ПРИЛОГ: потврде о учешћу на европским пројектима.

Пре избора у претходно звање:

- 5 2007-2008. године др Грујић-Бројчин је учествовала у европском пројекту (**STREP FP6**, No. 517039) под називом "Controlling Mesoscopic Phase Separation – CoMePhS".

2.4. Организација научних скупова

После избора у звање

Др Мирјана Грујић-Бројчин је као **члан организационог одбора учествовала у организацији 3 научне конференције** које је организовало Друштво за керамичке материјале Србије, и то 2011. године као национални, а затим, 2013. и 2015. године, као међународни скупови:

- 1 Прву конференцију Друштва за керамичке материјале Србије, 17-18. марта 2011. године у Београду
- 2 The 2nd Conference of Serbian Society for Ceramic Materials, June 5-7, 2013 (Belgrade Serbia)
- 3 Third Conference of Serbian Society for Ceramic Materials, June 15 – 17th, 2015 (Belgrade Serbia).

ПРИЛОГ: копије одговарајућих страница књига апстраката.

Пре избора у претходно звање

- 4 Др Мирјана Грујић-Бројчин била је ангажована у организационом одбору XVI Националног симпозијума о физици кондензоване материје СФКМ 2004 (20-23 септембар 2004, Сокобања)
- 5 Такође је учествовала у организацији конференције Физика и технологија материјала ФИТЕМ 05 (Чачак, 31.07.-03.08. 2005.) и ФИТЕМ 07 (Чачак, 6-8. август 2007.)

3. Организација научног рада

3.1 Руковођење потпројектима и пројектним задацима

У периоду 2011-2015. године, након избор у претходно звање, руководи једним потпројектом и једним пројектним задатком:

- 1 **Руководилац пројектног задатка** "Теоријски прорачуни и нумеричке симулације" у оквиру потпројекта "Нанооксидни материјали за примене у технологијама заштите животне средине" пројекта III45018 "Наноструктурни мултифункционални материјали и нанокомпозити" (2011-2015)
- 2 **Руководилац потпројекта** "Физика нанооксидних магнетних материјала" на пројекту ОН171032 „Физика наноструктурних оксидних материјала и јако корелисаних система“ (2011-2015)

Прилог: потврде руководиоца пројекта и испис из базе Министарства просвете науке и технолошког развоја.

3.2. Технолошки пројекти, патенти, иновације и резултати примењени у пракси:

Кандидаткиња је након претходног избора у звање активно учествовала и допринела успешној реализацији **2 иновациона пројекта** који су се односили на синтезу оксидних нанопрахова за различите примене:

- 1 2008-2009. године иновациони пројекат „Производња нанопрахова чистог и допираног анатаса врхунског квалитета помоћу сол-гел технологије“
- 2 2012-2013. године иновациони пројекат "Производња висококвалитетних TiO_2 нанопрахова ефикасних у фотокаталитичкој разградњи органских загађивача"

4. Квалитет научних резултата

Кандидаткиња је у свом досадашњем раду публиковала **87 научних радова**, од чега 42 радова у међународним часописима са ISI листе: **17 радова категорије M21** (врхунски међународни часописи), **7 категорије M22** (водећи међународни часописи) и **18 радова категорије M23** (међународни часописи са ISI листе). На међународним скуповима има 6 предавања по позиву: 3 публикована у целини (M31), 3 публикована у изводу (M32); 1 саопштење штампано у целини (M33) и 9 саопштења штампаних у изводу (M34). На националним конференцијама кандидаткиња има 2 предавања по позиву публикована у целини (M61) и 1 у изводу (M62), као и 7 саопштења штампаних у целини (M63) и 13 у изводу (M64). Коаутор је једне монографије од националног значаја M41, 2 рада на српском језику објављена у домаћим часописима националног значаја (M52) и 2 рада у националним часописима M52.

Након претходног избора у звање кандидаткиња је објавила **30 публикација**, од чега 18 у међународним часописима са ISI листе: **9 радова категорије M21** (врхунски међународни часописи), **2 категорије M22** (водећи међународни часописи) и **7 радова категорије M23** (међународни часописи са ISI листе). На међународним скуповима има 4 предавања по позиву објављена у изводу (M32) од чега 2 као позвани аутор, 2 саопштења објављена у целини (M33) и два у изводу (M34). На националним конференцијама коаутор је 1 предавања по позиву публикованог у изводу (M62) и два саопштења објављена у изводу. Коаутор је једног рада у националном часопису (M52) и једне монографије националног значаја (M41), као и једног поглавља у тематском зборнику (M44).

4.1. Утицајност

Према подацима индексне базе Web of Science на дан 07. децембра 2015. године радови др Мирјане Грујић Бројчин цитирани су **368 пута**, од чега **334 пута без аутоцитата**, са h - индексом једнаким 10.

Према подацима са сајта Google Scholar од истог дана радови кандидаткиње цитирани су **514 пута** са h - индексом који износи 13.

Пет најцитиранијих радова кандидаткиње према сајту Google Scholar:

	Број цитата
1 Šćepanović, M., Grujić-Brojčin, M., Vojisavljević, K., Bernikc, S., Srećković, T. Raman study of structural disorder in ZnO nanopowders (2010) Journal of Raman Spectroscopy, 41 (9), pp. 914-921.	86
2 Z. D. Dohčević-Mitrović, M. J. Šćepanović, M.U. Grujić-Brojčin, Z.V. Popović, S.B. Bošković, B. M. Matović, M.V. Zinkevich, F. Aldinger The size and strain effects on the Raman spectra of Ce _{1-x} Nd _x O _{2-δ} (0≤x≤0.25) nanopowders, Solid State Communications 137 (2006) 387–390	76
3 M. Grujić-Brojčin, M. J. Šćepanović, Z. D. Dohčević-Mitrović, I. Hinić, B. Matovic, G. Stanišić, and Z. V. Popović Infrared study of laser synthesized anatase TiO ₂ nanopowders Journal of Physics D: Applied Physics 38 (2005) 1415-1420	54
4 M. J. Šćepanović, M. Grujić-Brojčin, Z. D. Dohčević-Mitrović, Z. V. Popović Characterization of Anatase TiO ₂ Nanopowder by Variable-Temperature Raman	42

- 5 Z. D. Dohčević-Mitrović, M. Grujić-Brojčin, M. Šćepanović, Z. V. Popović, S. Bošković, B. Matović, M. Zinkevich and F. Aldinger
Ce_{1-x}Y(Nd)_xO_{2-δ} nanopowders: potential materials for intermediate temperature solid oxide fuel cells
J. Phys.: Condens. Matter 18 (2006) S2061–S2068 39

4.2. Параметри квалитета часописа и позитивна цитираност кандидатских радова

Након претходног избора у звање, од укупно 18 радова из групе M20, кандидаткиња у је у категорији M21 већину радова објавила у врхунским и водећим часописима са ISI листе који су релевантни у областима *Material Science - Multidisciplinary*, *Ceramics*, *Characterization and Testing* итд. Ови часописи баве се доминантно мултидисциплинарном тематиком наноматеријала и нанотехнологија, методама карактеризације, керамичким материјалима и материјалима који су кандидати за фотокаталитичке примене. У табели су приказани тренутни импакт фактори и позиције неких од ових часописа у одговарајућим областима (извор: КОБСОН):

	IF2014	Позиција часописа (2014)
Journal of Applied Crystallography	3.984	Crystallography (3/23)
Annalen der Physik	3.048	Physics, Multidisciplinary (12/78)
Journal of Raman Spectroscopy	2.671	Spectroscopy (11/44)
Ceramics International	2.605	Materials Science, Ceramics (4/26)
Materials Research Bulletin	2.288	Materials Science, Multidisciplinary (67/260)
Materials Chemistry and Physics	2.259	Materials Science, Multidisciplinary (69/260)
Journal of Nanoparticle Research	2.184	Materials Science, Multidisciplinary (76/260)
Journal of Applied Physics	2.183	Physics, Applied (42/144)
Materials Characterization	1.845	Materials Science, Characterization & Testing (4/33)
Journal of Sol-Gel Science and Technology	1.532	Materials Science, Ceramics (7/26)

4.3. Ефективни број радова и број радова нормиран на основу броја коаутора

У категорији међународних радова са ISI листе, од 18 радова објављених у категорији M20 после избора у претходно звање, 13 радова има 7 и мање аутора.

Из категорије радова M21 објављених након претходног избора у звање сви радови осим радова нумерисаних са 2 и 5 баве се процесима синтезе и карактеризације синтетисаних наноматеријала (видети Списак радова). Радови 2 и 5 баве се применом метода нумеричке симулације у инфрацрвеној и Раманових спектроскопији наноматеријала, редом, и имају мање од 7 аутора. Радови 8 и 9 баве се модификацијом метода синтезе и оптичком карактеризације ZnO нанопорова и нумеричким моделима за обраду и тумачење експерименталних резултата и такође имају мање од 7 аутора. Сви ови радови се узимају са пуном тежином.

Радови 1, 3, 4, 6 и 7 из категорије M21 баве се синтезом и карактеризацијом чистих и допираних нанопорова титанијум диоксида, са циљем да се тестира њихова ефикасност у фотокаталитичкој деградацији специфичних органских загађивача. По својој природи оваква истраживања увек укључују већи број истраживача из више

институција, било због специфичности синтезе, било због сложености карактеризације, тј. неопходности примене већег броја експерименталних техника које се по правилу не могу све наћи у једној институцији, због чега је на изради ових радова учествовао број аутора већи од 7 (редом: 8, 10, 10, 9 и 9 аутора).

Рад из категорије M22 се узима у пуној тежини (4 аутора).

На 8 радова из категорије M23 објављених након избора у претходно звање учествовало је 7 и мање аутора и сви се узимају са пуном тежином, јер се ради о експерименталним радовима.

Имајући у виду укупан број радова кандидаткиње и број бодова из групација M20, M30 и M40, нормирање радова са бројем аутора већим од 7 не би утицало значајно на укупне квалификације кандидаткиње за избор у звање научни саветник.

4.4. Степен самосталности и степен учешћа кандидата у реализацији научних радова у научним центрима у земљи и иностранству

Сви радови из категорије M21, који су публиковани након претходног избора у звање, рађени су у сарадњи са другим институцијама у земљи и иностранству. Само радови M22 и радови нумерисани са 3, 5 и 7 из категорије M23 урађени су у потпуности у оквиру Центра за физику чврстог стања и нове материјале Института за физику.

Др Мирјана Грујић Бројчин је од свих M20 радова објављених после њеног избора у претходно звање 2 пута била први аутор, а 8 пута други аутор. У овим радовима кандидаткиња се бавила организацијом и спровођењем истраживања или њихових значајних делова, било да су у питању експериментална мерења или нумеричке симулације и тумачење добијених резултата.

У свим наведеним радовима из библиографије, кандидаткиња је у великој мери учествовала у обради и тумачењу експерименталних резултата, што је најчешће обухватало примену нумеричких модела и оригиналног софтвера које је кандидаткиња у ту сврху развила. Она је такође била је незаменљива и у писању и припреми радова за објављивање, као и комуникацији са рецензентима и издавачима током поступка објављивања.

У радовима 1, 3, 4, 6 и 7 из категорије M21, који су рађени у сарадњи са домаћим научним институцијама (Институт Винча, Технолошки и Рударски факултет Универзитета у Београду, Хемијски факултет Универзитета у Новом Саду), др Мирјана Грујић Бројчин, сарађивала је у експерименталном делу рада (Рамановој и фотолуминесцентној спектроскопији и спектроскопској елипсометрији) и руководила и или/самостално спроводила део истраживања који се односи на креирање нумеричких модела, софтвера и њихове примене на конкретне експерименталне резултате из области Раманове и фотолуминесцентне спектроскопије, спектроскопске елипсометрије и области моделовања порозних својстава фотокатализатора.

У раду M21 под редним бројем 2, кандидаткиња је самостално спровела креирање и примену нумеричких модела и кодова у области инфрацрвене спектроскопије оксидних нанопрахова и поређење резултата различитих нумеричких симулација. У раду M21 под редним бројем 5 др Грујић-Бројчин самостално је обрађивала експерименталне резултате Раманове спектроскопије (мерене у следећим институцијама: Institut für Mineralogie, Leibniz Universität Hannover, Germany, CNRS and Université Pierre and Marie Curie, France) нумеричким методама које је прилагодила испитиваним материјалима.

У радовима 8 и 9 из категорије M21 у сарадњи са Центром за мултидисциплинарне студије Универзитета у Београду, др Мирјана Грујић Бројчин је

уз коришћење софтвера чији је аутор, учествовала у нумеричкој обради и тумачењу експерименталних резултата, који су део докторске тезе др Катарине Војисављевић.

У свим радовима из категорија M22 и M23 насталим након избора у претходно звање, кандидаткиња је учествовала у свим фазама експерименталног рада, самостално развијала нумеричке моделе и кодове, бавила се обрадом експерименталних резултата, као и писањем значајног дела радова везаног за тумачење и поређење експерименталних и нумеричких резултата.

Др Мирјана Грујић-Бројчин је током 2015. године одржала 3 предавања по позиву, једно на међународном скупу, из области нумеричких симулација у оптичкој спектроскопији порозних наноматеријала, и 2 из области примене експерименталних метода оптичке спектроскопије у проучавању културног наслеђа (1 на скупу националног значаја и 1 на међународним скупу).

Кандидаткиња је дала велики допринос као коаутор монографије од националног значаја (Оптичка спектроскопија наноматеријала, M41) директно се бавећи поглављима која се односе на инфрацрвену, Раманову и фотолуминесцентну спектроскопију оксидних нанопрахова, а посебно резултатима бројних нумеричких симулација, проистеклих из њене докторске тезе и каснијих истраживања.

4.5. Допринос кандидата реализацији коауторских радова

Кандидаткиња, др Мирјана Грујић-Бројчин, је као коаутор дала оригиналан допринос у свих 18 радова категорија M20, објављених након избора у претходно звање, пре свега кроз креирање и модификацију нумеричких модела и оригиналних кодова за обраду и тумачење инфрацрвених и Раманових спектра широке класе наноматеријала, као и модела и софтвера за испитивање својстава порозности мезопорозних нанопрахова. У већем делу радова бавила се и експерименталним радом (инфрацрвена, Раманова и фотолуминесцентна мерења, затим спектроскопска елипсометрија), самостално или у сарадњи са другим ко-ауторима. Експерименталне активности у области проучавања културног наслеђа обавља самостално, дајући својим тумачењем значајан допринос мултидисциплинарним активностима и истраживањима, карактеристичним за област проучавања културног наслеђа.

4.6. Значај радова

Др Мирјана Грујић-Бројчин је као истраживач и аутор развила методе за моделовање инфрацрвених, Раманових и фотолуминесцентних спектра широке класе наноматеријала, пре свега оксидних нанопрахова, као и софтвер за моделовање порозних својстава мезопорозних нанопрахова, који је коришћен у великом броју публикованих истраживања и неколико докторских дисертација.

Кандидаткиња је дала значајан допринос карактеризацији и моделовању оптичких својстава чистих и допираних оксидних наноматеријала на путу повезивања услова синтезе наноструктура са њиховим циљаним карактеристикама за потребе специфичних примена, као што је фотокатализа органских загађивача животне средине (лекова, пестицида, хербицида).

Последњих година препозната је као веома активан истраживач у области примене инфрацрвене, Раманове и фотолуминесцентне спектроскопије у проучавању објеката културног наслеђа (бојених површина, античких и средњовековних керамика), где активно учествује у широкој иницијативи изучавања и конзервације културног наслеђа Републике Србије.

Списак радова др Мирјане Грујић-Бројчин

Рад у врхунском међународном часопису – M21 (17)

Радови објављени након претходног избора у звање (9)

- 1 N. Tomić, M. Grujić-Brojčin, N. Finčur, B. Abramović, B. Simović, J. Krstić, B. Matović, M. Šćepanović
Photocatalytic degradation of alprazolam in water suspension of brookite type TiO₂ nanopowders prepared using hydrothermal route
Materials Chemistry and Physics 163 (2015) 518-528
- 2 Z.V. Popović, M. Grujić-Brojčin, N. Paunović, M.M. Radonjić, V.D. Araújo, M.I.B. Bernardi, M.M. de Lima, A. Cantarero
Far-infrared spectroscopic study of CeO₂ nanocrystals
Journal of Nanoparticle Research 17(1) (2015) 1-7
- 3 M. Grujić-Brojčin, S. Armaković., N. Tomić, B. Abramović., A. Golubović, B. Stojadinović., A. Kremenović, B. Babić, Z. Dohčević-Mitrović, M. Šćepanović.
Surface modification of sol-gel synthesized TiO₂ nanoparticles induced by La-doping
Materials Characterization 88 (2014) 30-41.
- 4 A Golubović, N Tomić, N Finčur, B Abramović, I Veljković, J Zdravković, M Grujić-Brojčin, B Babić, B Stojadinović, M Šćepanović
Synthesis of pure and La-doped anatase nanopowders by sol–gel and hydrothermal methods and their efficiency in photocatalytic degradation of alprazolam
Ceramics International 40(8) (2014) 13409-13418
- 5 A. Kremenović, M. Grujić Brojčin, A.-M. Welsch, P. Colomban
Heterogeneity in iron-doped titania flower-like nanocrystalline aggregates: Detection of brookite and anatase/rutile size-strain modeling
Journal of Applied Crystallography 46 (6) (2013) 1874-1876.
- 6 A. Golubović, B. Abramović, M. Šćepanović, M. Grujić-Brojčin, S. Armaković, I. Veljković, B. Babić, Z. Dohčević-Mitrović, and Z. V. Popović
"Improved efficiency of sol-gel synthesized mesoporous anatase nanopowders in photocatalytic degradation of metoprolol"
Materials Research Bulletin 48 (4) (2013) 1363-1371.
- 7 M. Šćepanović, B. Abramović, A. Golubović, S. Kler, M. Grujić-Brojčin, Z. Dohčević-Mitrović, B. Babić, B. Matović, Z. V. Popović
"Photocatalytic degradation of metoprolol in water suspension of TiO₂ nanopowders prepared using sol–gel route"
Journal of Sol-Gel Science and Technology 61 (2012) 390–402
- 8 M. Šćepanović, M. Grujić-Brojčin, K. Vojisavljević, and T. Srećković
"Defect induced variation in vibrational and optoelectronic properties of nanocrystalline ZnO powders"
Journal of Applied Physics 109 (2011) 034313
- 9 M. Šćepanović, M. Grujić-Brojčin, K. Vojisavljević, S. Bernik and T. Srećković
"Raman study of structural disorder in ZnO nanopowders"
Journal of Raman Spectroscopy 41 (2010) 914–921

Радови објављени пре претходног избора у звање (8)

- 10 K. Vojisljević, M. Šćepanović, T. Srećković, M. Grujić-Brojčin, Z. Branković and G. Branković
Structural characterization of mechanically milled ZnO: influence of zirconia milling media
J. Phys.: Condens. Matter 20 (47) (2008) 475202
- 11 M. J. Šćepanović, M. Grujić-Brojčin, Z. D. Dohčević-Mitrović, Z. V. Popović
Temperature dependence of the lowest frequency Eg Raman mode in laser-synthesized anatase TiO₂ nanopowder
Appl. Phys. A 86 (3) (2007) 365-371
- 12 Z. D. Dohčević-Mitrović, M. Radović, M. Šćepanović, M. Grujić-Brojčin, Z. V. Popović, B. Matović and S. Bošković
Temperature-dependent Raman study of Ce_{0.75}Nd_{0.25}O_{2-δ} nanocrystals
Appl. Phys. Lett. 91 (2007) 203118
- 13 I. Bineva, D. Nesheva, M. Šćepanović, M. Grujić-Brojčin, Z.V. Popović, Z. Levi
Dependence of photoluminescence from a-Si nanoparticles on the annealing time and exciting wavelength
Journal of Luminescence 126 (2007) 7-13
- 14 Z. D. Dohčević-Mitrović, M. Grujić-Brojčin, M. Šćepanović, Z. V. Popović, S. Bošković, B. Matović, M. Zinkevich and F. Aldinger
Ce_{1-x}Y(Nd)_xO_{2-δ} nanopowders: potential materials for intermediate temperature solid oxide fuel cells
J. Phys.: Condens. Matter 18 (2006) S2061-S2068
- 15 M. Grujić-Brojčin, M. J. Šćepanović, Z. D. Dohčević-Mitrović, I. Hinić, B. Matovic, G. Stanišić, and Z. V. Popović
Infrared study of laser synthesized anatase TiO₂ nanopowders,
Journal of Physics D: Applied Physics 38 (2005) 1415-1420
- 16 M. Grujić, R. Kostić, D. Raković, and L.A. Gribov
Calculation of Vibrational Spectra of Zig-Zag Single – Wall Nanotubes
Materials Science Forum 352 (2000) 123-128
- 17 R. Kostić, D. Raković, and M. Grujić
Vibrational Properties and Structure of Carbon Nanotubes Based on C₆₀ Molecule and its Symmetry
Materials Science Forum 282-283 (1998) 109-114

Рад у водећем међународном часопису – M22 (7)

Радови објављени након претходног избора у звање (2)

- 1 Z.V. Popović, Z. Dohčević-Mitrović, M. Šćepanović, M. Grujić-Brojčin and S. Aškrabić
"Raman scattering on nanomaterials and nanostructures"
Annalen Der Physik 523(1-2) (2011) 62-74, Special Topic Issue "Optical and Vibrational Spectroscopies"
- 2 M. J. Šćepanović, M. Grujić-Brojčin, Z. D. Dohčević-Mitrović, Z. V. Popović
"Characterization of Anatase TiO₂ Nanopowder by Variable-Temperature Raman

Spectroscopy"
Science of Sintering, 41 (2009) 67-73
DOI: 10.2298/SOS0901067S

Радови објављени пре претходног избора у звање (5)

- 4 M. J. Šćepanović, M. Grujić-Brojčin, Z. Dohčević-Mitrović, Z. V. Popović
Vibrational spectroscopy methods in the characterization of nanostructured materials
J. Optoelectron. Adv. M. 9 (1) (2007) 30-36
- 5 M. J. Šćepanović, M. Grujić-Brojčin, I. Bineva, D. Nesheva, Z. Aneva, Z. Levi, Z. V. Popović
Raman study of ZnSe/SiO_x multilayers
J. Optoelectron. Adv. M. 9 (1) (2007) 178-181.
- 6 M. Radović, Z. D. Dohčević-Mitrović, M. Šćepanović, M. Grujić-Brojčin, B. Matović S. Bošković, and Z.V. Popović
Raman study of Ba-doped ceria nanopowders
Science of Sintering 39 (2007) 281-286
- 3 Z. Dohčević-Mitrović, M. J. Šćepanović, M.U. Grujić-Brojčin, Z.V. Popović, S.B. Bošković, B. M. Matović, M.V. Zinkevich, F. Aldinger
The size and strain effects on the Raman spectra of Ce_{1-x}Nd_xO_{2-δ} (0≤x≤0.25) nanopowders
Solid State Communications 137 (2006) 387–390
- 7 M. Grujić-Brojčin, M. Šćepanović, Z. Dohčević-Mitrović, and Z. V. Popović
Infrared study of nonstoichiometric anatase TiO₂ nanopowders
Science of Sintering 38 (2006) 183-189

Рад у међународном часопису – M23 (15)

Радови објављени након претходног избора у звање (7)

- 1 Aleksandar Golubović, Ivana Veljković, Maja Šćepanović, Mirjana Grujić-Brojčin, Nataša Tomić, Dušan Mijin, Biljana Babić
Influence of some sol-gel synthesis parameters of mesoporous TiO₂ on photocatalytic degradation of pollutants
Chemical Industry and Chemical Engineering Quarterly OnLine-First Issue 00 (2015) 20-20
- 2 A Golubović, B Simović, M Šćepanović, D Mijin, A Matković, M Grujić-Brojčin, B Babić
Synthesis of anatase nanopowders by sol-gel method and influence of temperatures of calcination to their photocatalytic properties
Science of Sintering 47(1) (2015) 41-49
- 3 M. Šćepanović, S. Aškrabić, M. Grujić-Brojčin, A. Golubović, Z. Dohčević-Mitrović, B. Matović and Z.V. Popović
Raman study of vanadium-doped titania nanopowders synthesized by sol-gel method
International Journal Of Modern Physics B 24(6-7) (2010) 667-675
- 4* M. Šćepanović, M. Grujić-Brojčin, M. Mirić, Z. Dohčević-Mitrović and Z.V. Popović
"Optical Characterization of Laser-Synthesized Anatase TiO₂ Nanopowders by Spectroscopic Ellipsometry and Photoluminescence Measurements"

Acta Physica Polonica A 116 (4) (2009) 603-606

- 5* M. Šćepanović, M. Grujić-Brojčin, D. Nesheva, Z. Levi, I. Bineva and Z.V. Popović
"Characterization of ZnSe Nanolayers by Spectroscopic Ellipsometry"
Acta Physica Polonica A 116 (4) (2009) 708-711
- 6* M. Grujić-Brojčin, M.J. Šćepanović, Z.D. Dohčević-Mitrović and Z.V. Popović
"Use of Phonon Confinement Model in Simulation of Raman Spectra of Nanostructured Materials"
Acta Physica Polonica A Vol. 116(1) (2009) 51-54
- 7* M. Šćepanović, S. Aškrabić, M. Grujić-Brojčin, A. Golubović, Z. Dohčević-Mitrović, A. Kremenović and Z.V. Popović
"Low-Frequency Raman Spectroscopy of Pure and La-Doped TiO₂ Nanopowders Synthesized by Sol-Gel Method"
Acta Physica Polonica A 116 (1) (2009) 94-102

Радови објављени пре претходног избора у звање (11)

- 8 A. Milutinović, Z. Dohčević-Mitrović, D. Nesheva, M. Šćepanović, M. Grujić-Brojčin and Z.V. Popović
Infrared and Photoluminescence Study of Rapidly Thermally Annealed SiO_x Thin Films
Materials Science Forum 555 (2007) 309-314
- 9* M. J. Šćepanović, M. Grujić-Brojčin, Z. Dohčević-Mitrović, K. Vojisavljević, T. Srećković and Z.V. Popović
The Effects of Nonstoichiometry on Optical Properties of Oxide Nanopowders
Acta Physica Polonica A 112(5) (2007) 1013-1018
- 10 M. J. Šćepanović, M. U. Grujić-Brojčin, Z. D. Dohčević-Mitrović, and Z. V. Popović,
Effects of confinement, strain and nonstoichiometry on Raman spectra of anatase TiO₂ nanopowders,
Materials Science Forum 518 (2006) 101-106
- 11 M. Šćepanović, Z. D. Dohčević-Mitrović, I. Hinić, M. Grujić-Brojčin, G. Stanišić, and Z. V. Popović,
Photoluminescence of laser-synthesized anatase titanium dioxide nanopowders,
Materials Science Forum 494 (2005) 265-270
- 12 N. Romčević, R. Kostić, M. Romčević, M. Grujić-Brojčin, M. I. Čomor, V.V. Vodnik and J.M. Nedeljković
Cd_{1-x}Mn_xS Nanoparticles: Far-infrared Phonon Spectroscopy
Materials Science Forum 480-481 (2005) 237-242
- 13 R. Kostić, N. Romčević, M. I. Čomor, M. Romčević, M. Grujić-Brojčin, V.V. Vodnik and J.M. Nedeljković
Far-Infrared Phonon Spectroscopy of Cd_{1-x}Mn_xS Quantum Dots
Materials Science Forum 453-454 (2004) 293-298
- 14 M. Grujić, R. Kostić and D. Raković
Vibrational Calculation of Single-Wall Armchair Carbon Nanotubes of Small Diameter
Materials Science Forum 413 (2003) 45-48
- 15 R. Kostić, D. Raković, and M. Grujić
Vibrational Properties of Single-wall Nanotubes Based on Structure of C₆₀
Solid State Phenomena 61-62 (1998) 313-316

Предавање по позиву са међународног скупа штампано у целини – M31 (3)

Радови објављени након претходног избора у звање (1)

- 1 M. Šćepanović, M. Grujić-Brojčin, Z. Dohčević-Mitrović, and Z. V. Popović
Investigation of vibrational and electronic properties of oxide nanopowders by spectroscopic methods
Journal of Physics: Conference Series 253 (2010) 012015

Радови објављени пре претходног избора у звање (2)

- 2 Z. V. Popović, Z. Dohčević-Mitrović, M. Šćepanović and M. Grujić-Brojčin
Nanopowders Characterization using the Optical spectroscopy methods
Advances in Science and Technology 45 (2006) 327-336 (Proceedings Set of 11th International ceramic Congress-CIMTEC 06, Acireale 2006, Sicily, Italy)
- 3 Z. V. Popović, Z. Dohčević-Mitrović, M. Šćepanović and M. Grujić-Brojčin
Nanopowders characterization using the vibrational spectroscopy methods,
Proc. 1st International Workshop on Nanoscience & Nanotechnology IWON 2005,
Belgrade, Serbia and Montenegro, pp. 88-93 (2005)

Предавање по позиву са међународног скупа штампано у изводу – M32 (3)

Радови објављени након претходног избора у звање (2)

- 1 M. Grujić-Brojčin, M. Šćepanović, Z.V. Popović
Numerical Models in Analysis of Morphological Properties of Oxide Nanopowders
SFKM, The 19th Symposium on Condensed Matter Physics , November 09-11, 2015,
Belgrade, Book of Abstracts p.20
- 2 M. Grujić-Brojčin, M. Šćepanović
THE APPLICATION OF RAMAN SPECTROSCOPY IN THE ANALYSIS OF ANCIENT CERAMICS
3CSSCS-2015, 3rd Conference of The Serbian Society for Ceramic Materials, June 15-17,
2015, Belgrade,
Book of Abstracts, p. 49

Радови објављени пре претходног избора у звање (1)

- 3 Z. V. Popović, Z. Dohčević-Mitrović, M. Šćepanović and M. Grujić-Brojčin
Characterization of nanopowders using optical methods
6th International Conference of the Balkan Physical Union-BPU, Istanbul, Turkey, August
22-26, 2006, Book of Abstracts p.50

Саопштење са међународног скупа штампано у целини - M33 (1)

Радови објављени након претходног избора у звање (1)

- 1 M. Grujić-Brojčin, D. Rogić, M. Gajić-Kvašček, M. Šćepanović
The Application of Raman Spectroscopy in Cultural Heritage: A Preliminary Study of Blue Pigments from Fresco Painted Tomb from Sirmium
AIS3 - Italian - Serbian Bilateral Workshop on "Science for Cultural heritage", Eds. P. Batinelli, J. Striber, November 12, 2013, Museum of Yugoslav History, Belgrade

Саопштење са међународног скупа штампано у изводу – М34 (8)

Радови објављени након претходног избора у звање (2)

- 1 D. Marinčev, M. Grujić-Brojčin, S. Stevanović, M. Radović, M. Šćepanović, Z.D. Dohčević-Mitrović
The Raman spectroscopy of TiO_2/WO_3 coatings formed by plasma electrolytic oxidation
2nd Conference of The Serbian Ceramic Society, Programme and the book of abstracts
2CSCS-2013. June 5-7. 2013, Belgrade Serbia
- 2 K. Vojisavljević, M. Šćepanović, M. Grujić-Brojčin, S. Savić, J. Ćirković, T. Srećković
Variation in optical and electronic properties of ZnO induced by mechanical milling and thermal treatment
1st Conference of The Serbian Ceramic Society, Programme and the book of abstracts
1CSCS-2013. March 17-18, 2011, Belgrade Serbia

Радови објављени пре претходног избора у звање (7)

- 3 M. Grujić-Brojčin, M. J. Šćepanović, Z. D. Dohčević-Mitrović, Z. V. Popović
Use of Phonon Confinement Model in Simulation of Raman Spectra of Nanostructured Materials
European Materials Research, EMRS Fall Meeting 2008, Warsaw, 15-19th September 2008, Scientific Programme and Book of Abstracts, p.32
- 4 S. Aškrabić, Z. Dohčević-Mitrović, M. Radović, M. Šćepanović, M. Grujić-Brojčin, B. Matović and Z. V. Popović
Raman study of oxygen vacancy behaviour in ceria nanopowders doped with Nd, Y and Gd
1st International Conference from Nanoparticles & Nanomaterials to Nanodevices & Nanosystems, Halkidiki Greece, June 16th -18th, 2008
- 5 Z. D. Dohčević-Mitrović, A. Montone, S. Bošković, M. Radović, M. Šćepanović, M. Grujić-Brojčin and Z. V. Popović
Oxygen vacancy study in $\text{Ce}_{0.75}\text{Nd}(\text{Y})_{0.25}\text{O}_{2-x}$ nanocrystals by Raman and XPS spectroscopy
2nd International Congress on Ceramics, Verona, June 29th - July 4th, 2008, p. 84
- 6 Z. D. Dohčević-Mitrović, Z.V. Popović, M.J. Šćepanović, M.U. Grujić-Brojčin, S. B. Bošković, B. M. Matović and M. Radović
Raman study of anharmonicity and phase separation in $\text{Ce}_{0.85}\text{Gd}_{0.15}\text{O}_{2-\delta}$
ICSAM-2007, International conference on structural analysis of advanced materials, Patras 2007, Greece, Book of abstracts p. 103
- 7 M. Grujić-Brojčin, Z. Dohčević-Mitrović, M. Šćepanović, B. Matović, S. Bošković, M. Radović and Z. V. Popović
Raman study of Ba-doped ceria nanopowders
6th International Conference of the Balkan Physical Union-BPU, Istanbul, Turkey, August 22-26, 2006, Book of Abstracts p.760

- 8 I. Bineva, D. Nesheva, M. Šćepanović, M. Grujić-Brojčin, Z. V. Popović, Z. Levi, Dependence of photoluminescence from a-Si nanoparticles on the annealing time and exciting wavelength, NANO 2005, 7th National Workshop Nanoscience & Nanotechnology, November 24-26, 2005, Sofia, Bulgaria, Program and Abstracts, p. 31
- 9 I. Bineva, D. Nesheva, Z. V. Popović, M. Šćepanović, M. Grujić-Brojčin, Z. Levi, Dependence of photoluminescence from a-Si nanoparticles in a-SiO_x matrix on the annealing time
Functional properties of Functional Materials NATO Advanced Study Institute, Sozopol, Bulgaria, June, 3-15 2005, p. 5-11

Монографија од националног значаја - M41

Радови објављени након претходног избора у звање (1)

- 1 З. Д. Дохчевић-Митровић, М.Ј. Шћепановић, М. Грујић-Бројчин, З. В. Поповић "Оптичка својства наноматеријала"
Институт за физику, Академска мисао 2011.

Рад у истакнутом тематском зборнику водећег националног значаја - M44

Радови објављени након претходног избора у звање (1)

- 1 M. Grujić-Brojčin, I. Vranić Ivan, M. Gajić-Kvašček, M. Šćepanović, V. Krstić
Arheološki lokalitet „Kale“ u Krševici: preliminarno istraživanje porekla i tehnologije izrade keramičkog materijala primenom ramanove i XRF spektroskopije
Tematski zbornik LANTERNA 2014 (ISBN 978-86-7306-132-0 i ISBN 9788683603893)
Institut za nuklearne nauke Vinča i Galerija Matice srpske, pp.1-15

Рад у водећем часопису националног значаја – M51 (2)

Радови објављени након претходног избора у звање (1)

- 1 N. Ž. Lazarević, Z. D. Dohčević-Mitrović, M. U. Grujić-Brojčin, M. J. Šćepanović, M. B. Radović, Z. V. Popović
Defektna stanja u nanokristalima Ce_{0.85}Nd(Gd)_{0.15}O_{2-δ} proučavana metodom Raman spektroskopije
Hemijaska industrija 63 (3) (2009) 221–226

Радови објављени пре претходног избора у звање (1)

- 2 M. Grujić-Brojčin, Z. Dohčević-Mitrović, M. Šćepanović, Z. V. Popović, S. Bošković, M. Zinkevic, F. Aldinger, B. Matović
Ramanovo rasejanje na Ce_{1-x}Y(Nd)_xO₂ nanoprahovima
Metalurgija – Journal of Metalurgy 1-12 (2006) 62-68

Рад у часопису националног значаја – М52 (2)

Радови објављени пре претходног избора у звање (2)

- 1 R. Kostić, D. Raković, and M. Grujić
Symmetry Considerations and Vibrational Spectra of Fullerene Molecules
Fullerene and Nanotube Review 1(4) (1997) 55-60
- 2 J. P. Šetrajčić, S. M. Stojković, I. D. Vragović, R. S. Kostić, D. I. Raković, M. U. Grujić and D. K. Veljković
Superconductivity and Fullerenes
Fullerenes & Nanotubes Review 2(1) (1998) 23-33

Предавање по позиву са скупа националног значаја штампано у целини – М61 (2)

Радови објављени пре претходног избора у звање (2)

- 1 Z. D. Dohčević-Mitrović, M. Šćepanović, I. Hinić, M. Grujić-Brojčin, G. Stanišić and Z. V. Popović
Raman and infrared study of nanostructured materials,
XVI National Symposium on Condensed Matter Physics SFKM 2004, Sokobanja, Serbia and Montenegro, Program and Contributed Papers, 78-85 (2004)
- 2 M. Šćepanović, Z. D. Dohčević-Mitrović, M. Grujić-Brojčin and Z. V. Popović
Vibrational Spectroscopy Methods as a Powerful Tool for Nanomaterials Characterization
XII Symposium on Condensed Matter Physics – SFKM 07, Vršac – Serbia 2007, Program and Contributing Papers pp. 18-25

Предавање по позиву са скупа националног значаја штампано у изводу - М62 (1)

Радови објављени након претходног избора у звање (1)

- 1 M. Grujić-Brojčin, I. Vranić, M. Gajić-Kvašček, M. Šćepanović
Primena Ramanove spektroskopije za proučavanje kulturnog nasleđa: prvi rezultati ispitivanja keramike sa lokaliteta Kale-Krševica
LANTERNA - Nuklearne i druge analitičke tehnike u izučavanju kulturnog nasledja - zaštita baštine između prirodnih i društvenih naučnih oblasti - I nacionalni skup, 3 Novembar 2014., Novi Sad, Knjiga apstrakata p.16

Саопштење са скупа националног значаја штампано у целини – М63 (7)

Радови објављени пре претходног избора у звање (7)

- 1 M. Šćepanović, M. Grujić-Brojčin, Z. Dohčević-Mitrović, I. Hinić

- G. Stanišić, Z. V. Popović,
 Uticaj zagrevanja na fotoluminescentne i Raman spektre anataze TiO₂ nanoprahova,
 Zbornik radova sa Kongresa fizičara Srbije i Crne Gore, Petrovac na moru, 3-5 juna 2004,
 pp. 145-148
- 2 M. Grujić-Brojčin, M. Šćepanović, Z. Dohčević-Mitrović, I. Hinić, G. Stanišić, Z. V. Popović,
 Primena Brugemanove fenomenološke teorije efektivne sredine u modelovanju infracrvenih spektara TiO₂ nanopraha,
 Zbornik radova sa Kongresa fizičara Srbije i Crne Gore, Petrovac na moru, 3-5 juna 2004,
 pp. 57-60
 - 3 M. Grujić-Brojčin, M. Šćepanović, Z. Dohčević-Mitrović, I. Hinić, G. Stanišić, and Z. V. Popović,
 The effective medium theories in modeling of infrared reflectivity in inhomogeneous nanomixtures,
 XVI National Symposium on Condensed Matter Physics SFKM 2004, Sokobanja, Program and Contributed Papers, pp. 153-156
 - 4 Hinić, Z. Dohčević-Mitrović, M. Šćepanović, M. Grujić, G. Stanišić and Z. V. Popović,
 FTIR spectra of TiO₂-SiO₂ nanocomposites,
 XVI National Symposium on Condensed Matter Physics SFKM 2004, Sokobanja, Program and Contributed Papers, pp. 149-152
 - 5 Hinić, M. Šćepanović, Z. D. Dohčević-Mitrović, M. Grujić-Brojčin, G. Stanišić and Z. V. Popović,
 Prikaz metode za određivanje raspodele pora i čestica po veličinama u nanodimenzionim materijalima
 Zbornik radova sa naučnog skupa Fizika i tehnologija materijala – FITEM '04, Čačak 12-15 oktobra 2004, Fundamentalni problemi fizike i tehnologije materijala, pp. 186-191 (2004)
 - 6 D. Raković, R. Kostić, M. Grujić
 Novi Q1D elektronski materijali: provodni polimeri i ugljenične nanotube
 YU-polimeri 2002, Čačak, 28-31. maj 2002, Zbornik radova, pp. 23-32.
 - 7 M. Grujić, R. Kostić, D. Raković
 Raman spektroskopija jednoslojnih armchair nanotuba ekstremno malih poluprečnika
 XLV konferencija ETRAN, Bukovička Banja, 4-7. jun 2001., Zbornik radova, sveska IV, pp. 310-313

Саопштење са скупа националног значаја штампано у изводу – M64 (13)

Радови објављени након претходног избора у звање (2)

- 1 Nina L. Finčur, Nataša Z. Tomić, Mirjana U. Grujić-Brojčin, Maja J. Šćepanović, Biljana F. Abramović
 Efikasnost brukitnih TiO₂ nanoprahova u fotokatalitičkoj razgradnji alprazolama primenom UVA zračenja
 52. Savetovanje Srpskog hemijskog društva, 29-30, maj 2015., Novi Sad, Knjiga apstrakata, p. 80
- 2 S. Armaković, B. Abramović, M. Grujić-Brojčin, M. Šćepanović, A. Golubović
 Influence of calcination temperature of La-doped titania to the degradation efficiency of beta

blockers in water suspension
Thirteenth Young Researchers Conference – Materials Science and Engineering, Dec. 10-12,
2014, Book of abstracts p.34

Радови објављени пре претходног избора у звање (11)

- 1 M. J. Šćepanović, M. U. Grujić-Brojčin, Z. D. Dohčević-Mitrović, S. Aškrabić, R. Kostić, and Z. V. Popović
Raman Spectroscopy Method for Determination of Particle Size Distribution in Anatase TiO₂ Nanopowders
9th Yugoslav Materials Research Society Conference YUCOMAT 07, Herceg Novi, September 10-14. 2007, Book of Abstracts, p.54
- 2 M. J. Šćepanović, M. Grujić-Brojčin, Z. D. Dohčević-Mitrović, and Z. V. Popović
Characterization of anatase TiO₂ nanopowder by variable-temperature Raman spectroscopy
VII Scientific Meeting, Physics and Technology of Materials FITEM 07, Čačak, August 6 – 8, 2007, Book of Abstracts, p. 39
- 3 M. J. Šćepanović, M. U. Grujić-Brojčin, Z. D. Dohčević-Mitrović, and Z. V. Popović,
Effects of nonstoichiometry and strain on Raman spectra of anatase TiO₂ nanopowders,
7th Yugoslav Materials Research Society Conference YUCOMAT 05, Herceg Novi, September 12-16, 2005, Book of abstracts, p.52
- 4 M. Grujić-Brojčin, M. Šćepanović, Z. Dohčević-Mitrović, Z. V. Popović,
Infrared study of nonstoichiometric anatase TiO₂,
Physics and Technology of Materials – FITEM '05, Čačak 2005, p. 17
- 5 M. Šćepanović, Z. Dohčević-Mitrović, I. Hinić, M. Grujić-Brojčin, G. Stanišić, and Z. V. Popović
Photoluminescence of laser-synthesized anatase titanium dioxide nanopowders,
6th Yugoslav Materials Research Society Conference YUCOMAT 04, Herceg Novi, September 13-17, 2004, Book of abstracts, p. 34
- 6 R. Kostić, N. Romčević, M. I. Čomor, M. Romčević, M. Grujić-Brojčin, V.V. Vodnik and J.M. Nedeljković
Far-Infrared Phonon Spectroscopy of Cd_{1-x}MnxS Quantum Dots
5th Yugoslav Materials Research Society Conference YUCOMAT 03, Herceg Novi, September 10-14, 2003, Book of Abstracts p. 45
- 7 M. Grujić, R. Kostić, D. Raković, and L.A. Gribov
Vibrational Calculation of Some Armchair Carbon Single-Wall Nanotubes
XL Simpozijum srpskog hemijskog društva, 18-19 januar 2001, Novi Sad, Zbornik apstrakata p.181
- 8 M. Grujić, R. Kostić, D. Raković
Vibrational Calculation of Single Wall Armchair Carbon Nanotubes of Small Diameter
4th Yugoslav Materials Research Society Conference YUCOMAT 97, Herceg Novi, September 15-19 2001, Book of Abstracts p. 28
- 9 M. Grujić, R. Kostić, D. Raković
Vibracioni računi nekih ugljeničnih jednoslojnih nanotuba
3rd Yugoslav Materials Research Society Conference YUCOMAT 99, Herceg Novi, September 20-24, 1999, Book of Abstracts p. 53
- 10 R. Kostić, D. Raković, and M. Grujić
Vibrational Properties of Single-wall Nanotubes Based on Structure of C60

Simpozijum o fizici kondenzovane materije SFKM '97, 29. septembar – 01. oktobar 1997, Kladovo, Zbornik apstrakata p.140

- 11 R. Kostić, D. Raković, and M. Grujić
Vibracione osobine i struktura karbonskih nanotuba zasnovanih na molekulu C_{60} i njegovoj simetriji
2nd Yugoslav Materials Research Society Conference YUCOMAT 97, Herceg Novi, September 15-19, 1997, Book of Abstracts p. 49

Одбрањена докторска дисертација – М71

Радови објављени пре претходног избора у звање

- 1 М. Грујић-Бројчин
Оптичка спектроскопија оксидних нанопрахова
Електротехнички факултет, Универзитет у Београду, 16. октобар 2008.

Одбрањен магистарски рад – М72

Радови објављени пре претходног избора у звање

- 1 М. Грујић
Вибрациона спектроскопија једнослојних угљеничних нанотуба
Електротехнички факултет, Универзитет у Београду, август 2000.

Елементи за квантитативну оцену научног доприноса др Мирјане Грујић-Бројчин за избор у звање научног саветника

Остварени резултати након претходног избора у звање

Укупно 30 публикација од чега 18 у међународним часописима категорије М20.

Један рад у водећем часопису националног значаја М51.

Једна монографија у категорији монографије националног значаја М41.

Категорија рада	М бодова по раду	Број радова	Укупно М бодова
М21	8	9	72
М22	5	2	10
М23	3	7 *	15
М31	3	1	3
М32	1.5	2	3
М33	1	1	1
М34	0.5	2	1
М41	7	1	7
М44	2	1	2
М51	2	1	2
М62	1	1	1
М64	0.2	2	0.4
УКУПНО		30	117.4

* 4 публикације М23, које су означене са * у приложеној библиографији, а које су објављене као рад са конференције у часопису са ISI листе, рачунате су са половином вредности бодова (1.5);

Поређење са минималним квантитативним условом за избор у звање научни саветник

М категорије	Услов	Остварени резултат
УКУПНО	65	117.4
М10+М20+М31+М32+М33+М41+М52	50	111
М11+М12+М21+М22+М23+М24+М31+М32	35	103

Укупни остварени резултати

Укупно 87 публикација од чега 42 у међународним часописима категорије М20.

Два рада у водећем часопису националног значаја М51 на српском језику.

Једна монографија у категорији монографије националног значаја М41.

Категорија рада	М бодова по раду	Укупно радова	Укупно М бодова
M21	8	17	136
M22	5	7	35
M23	3	18*	46.5
M31	3	3	9
M32	1.5	3	4.5
M33	1	1	1
M34	0.5	9	4.5
M41	7	1	7
M44	2	1	2
M51	2	2	4
M52	1.5	2	3
M61	1,5	2	3
M62	1	1	1
M63	0.5	7	3.5
M64	0.2	13	2,6
УКУПНО		87	262.6

* 5 публикација М23, које су означене са * у приложеној библиографији, а које су објављене као рад са конференције у часопису са ISI листе, рачунате су са половином вредности бодова (1.5);

ПРИЛОГ 1.2.

(предав. по позиву)

Subject Invitation to talk at SFKM 2015

From Leonardo Golubovic <Leonardo.Golubovic@mail.wvu.edu>
To myramyra@ipb.ac.rs <myramyra@ipb.ac.rs>
Cc popozor@ipb.ac.rs <popozor@ipb.ac.rs>, Nenad Vukmirovic
<nenad.vukmirovic@ipb.ac.rs>, Antun Balaz <antun@ipb.ac.rs>
Date 28 Mar 2015 06:06



Faculty of Physics University of Belgrade
Institute of Physics Belgrade
Institute for Nuclear Sciences "Vinca" Belgrade
Serbian Academy of Sciences and Arts

Dr. Mirjana Grujic-Brojcic
Institute of Physics
Belgrade

Dear Dr. Grujic-Brojcic,

On behalf of the Organizing and Program Committees and my own, it is my privilege and pleasure to offer you to give an invited talk at the **19th Symposium on Condensed Matter Physics - SFKM 2015**, to be held in Belgrade, Serbia, September 7-11, 2015.

We are hoping that you can accept the invitation and are looking forward to your response. More information about the conference can be found posted at <http://www.sfkm.ac.rs>

We would be very grateful if you could reply to our invitation within next few days as this would be very helpful for our planning of the conference.

We are looking forward to meeting you in Belgrade in September.

Sincerely yours,

SFKM 2015 Chair
Prof. Leonardo Golubovic
West Virginia University, USA

Conference Schedule**Book of Abstracts****Home****Topics****Committees****Invited Speakers****Program****Abstract Submission****Registration****Special Announcements****SFKM Charter Winners****Conference Events****Local Information****Contact****Invited Speakers**

- Marco Aprili, Université Paris-Sud 11
- Fakher F. Assaad, University of Würzburg
- Dora Balazs, Budapest University of Technology and Economics
- Stefano Baroni, Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA)
- Wolfgang Belzig, University of Konstanz
- Nataša Bibić, Vinča Institute of Nuclear Sciences
- Alexandre Bouzidine, Université de Bordeaux 1
- Emil Božin, Brookhaven National Laboratory
- Ivan Božović, Brookhaven National Laboratory
- Christoph Bruder, University of Basel
- Harald Brune, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne
- Hrvoje Buljan, University of Zagreb
- Emmanuele Cappelluti, Sapienza Università di Roma
- Milan Damjanović, Faculty of Physics Belgrade
- Edib Dobardžić, Faculty of Physics Belgrade
- Gyula Eres, Oak Ridge National Laboratory
- Leonardo Golubović, West Virginia University
- Mirjana Grujić-Brojčin, Institute of Physics Belgrade
- Bjørk Hammer, Aarhus University
- Igor Herbut, Simon Fraser University
- Zoran Ikonić, University of Leeds
- Zoran Ivić, Vinča Institute of Nuclear Sciences
- Vladimir Juričić, University of Utrecht
- Jane Kondev, Brandeis University
- Zorica Konstantinović, Institute of Physics Belgrade
- Igor M. Kulić, Institut Charles Sadron
- Nenad Lazarević, Institute of Physics Belgrade
- Marjana Ležaić, Forschungszentrum Jülich
- Stergios Logothetidis, Aristotle University of Thessaloniki
- Aleksandar Matković, Institute of Physics Belgrade
- Ivanka Milošević, Faculty of Physics Belgrade
- Milorad Milošević, University of Antwerp
- Milica Milovanović, Institute of Physics Belgrade
- Zoran Mišković, University of Waterloo
- Marija Mitrović Dankulov, Institute of Physics Belgrade
- Stevan Nađ-Perge, California Institute of Technology
- Branislav Nikolić, University of Delaware
- Predrag Nikolić, George Mason University
- Čedomir Petrović, Brookhaven National Laboratory
- Dragana Popović, Florida State University
- Velimir Radmilović, Faculty of Technology and Metallurgy Belgrade
- Zoran Radović, Faculty of Physics Belgrade
- Milan Rajković, Vinča Institute of Nuclear Sciences
- Miljko Satarić, Faculty of Technical Sciences Novi Sad
- Rastko Sknepnek, University of Dundee
- Đorđe Spasojević, Faculty of Physics Belgrade
- Dimitrije Stepanenko, Institute of Physics Belgrade
- Željko Šljivančanin, Vinča Institute of Nuclear Sciences
- Nenad Švrakić, Institute of Physics Belgrade
- Bosiljka Tadić, Jožef Stefan Institute
- Milan Tadić, School of Electrical Engineering Belgrade
- Darko Tanasković, Institute of Physics Belgrade
- Christian Teichert, Montan University
- Mihajlo Vanević, Faculty of Physics Belgrade
- Ivana Vasić, Institute of Physics Belgrade
- Vladan Vuletić, Massachusetts Institute of Technology
- Ilija Zeljković, Boston College

**Related Conferences**

Photonica 2015,
Belgrade, Serbia,
24-28 August 2015

YUCOMAT 2015,
Herceg-Novi, Montenegro,
31 Aug - 4 Sept 2015

[HOME](#)[ABOUT](#)[NEWS](#)[CONFERENCE](#)[ACTIVITIES](#)[MEMBERS](#)[LINKS](#)[CONTACT](#)[GENERAL](#)[COMMITTEES](#)[PROGRAMME](#)[REGISTRATION](#)[VENUE](#)[EVENTS](#)

Download the Final Programme of Third Conference of Serbian Society for Ceramic Materials, 15th – 17th June 2015

Programme

PLENARY LECTURES:

1. **Prof. Dr. Dragan Damjanović**, EPFL, Switzerland
"Morphotropic phase boundary systems: concept, materials and applications"
2. **Prof. Dr Paula Vilarinho**, University of Aveiro, Portugal
"Open questions on the role of porosity in ferroelectric thin films"
3. **Prof. Dr. J. Christian Schön**, Max-Planck Institute for Solid State Research, Stuttgart, Germany
"Nanomaterials: What Do Their Energy Landscapes Tell Us?"
4. **Prof. Dr. Rebholz Claus**, University of Cyprus, Cyprus
"Thermal and chemical stability of hexagonal boron nitride (h-BN) nanostructures"

INVITED LECTURES:

1. **Prof. Dr. Javier Garay**, University of California, Riverside, USA
"Processing and performance of transparent ceramics for light emission and light manipulation"
2. **Prof. Dr. Tahir Cagin**, Texas A&M University, USA
"Thermo-Electro-Mechanical Coupling in Piezoelectric Materials: Molecular Theories and Atomistic Simulations"
3. **Prof. Dr. Elisabetta Di Bartolomeo**, University of Tor Vergata, Italy
"Infiltrated $\text{La}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{Mg}_{0.2}\text{O}_{3-\delta}$ Based Fuel Cells for Biogas Feeding"
4. **Dr. Slavko Bernik**, IJS, Slovenia
"Structural and Microstructural Challenges for the Enhanced Thermoelectric Performance of ZnO-Based Ceramics"
5. **Prof. Dr. Enrico Traversa**, KAUST, Saudi Arabia
"Cerium oxide nanoparticles for antioxidant therapy perspectives"
6. **Dr. Tadej Rojac**, IJS, Ljubljana, Slovenia
"Processing and conductivity issues in BiFeO_3 -based piezoelectric ceramics"
7. **Prof. Dr. Darko Makovec**, IJS, Ljubljana, Slovenia
"Synthesis of magnetic and multifunctional nanocomposites based on the colloidal processing of nanoparticles"
8. **Dr. Andreja Gajović**, Institut Rudjer Boskovic, Zagreb, Croatia
"Titanate nanostructures for different applications"
9. **Dr. Cristina Ciomaga**, Faculty of Physics, University of Iasi, Iasi, Romania
"Ferroelectric-ferrite/CNT ceramic composites: synthesis, functional properties and modeling"
10. **Prof. Dr. Ravi Kumar**, Indian Institute of Technology, Madras, India
"Precursor derived ceramics for photocatalytic applications"
11. **Dr. Milica Vlahović**, Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Serbia
"Non-Destructive Evaluation of Sulfur-Polymer Composite Behavior under Induced Destruction Influence"
12. **Prof. Dr. Katsumi Yoshida**, Tokyo Institute of Technology, Tokyo, Japan
"Development of Porous SiC Ceramics Based on In-Situ Grain Growth"
13. **Dr. Miladin Radović**, Texas A&M University, USA
"On Anelastic and Dielectric Relaxation in Doped Ceria and Zirconia Ceramics"
14. **Dr. Mirjana Grujić-Brojčin**, Institute of Physics, University of Belgrade, Serbia
"The Application of Raman Spectroscopy in the Analysis of Ancient Ceramics"
15. **Dr. Maja Gajić Kvašček**, Institute of Nuclear Sciences Vinča, University of Belgrade, Serbia
"Pattern Recognition Techniques as Support for Archaeometric Study of Ceramic Artefacts"
16. **Dr. Miroslav Komljenović**, Institute for Multidisciplinary Research, University of Belgrade, Serbia
"Alkali activated materials: Crucial factors affecting the strength"
17. **Dr. Thomas Bräuniger**, Department of Chemistry, University of Munich (LMU), Germany
"Characterisation of Ceramic Systems by Solid-State NMR Spectroscopy"



Bulgarian Academy of Sciences
Institute of Solid State Physics
"George Nadjakov"



72, Tzarigradsko Chaussee Blvd.
1784 Sofia, Bulgaria <http://www.issp.bas.bg>
e-mail: director@issp.bas.bg

Telephone: (+359 2) 979/ ext.
Director: (+359 2) 875 80 61
Administration: (+359 2) 877 34 92
Chief Accountant: (+359 2) 875 50 61

To: Professor Maja Scepanovic
Center for Solid State Physics and New Materials
Institute of Physics,
Pregrevica 118, 11080 Belgrade
Serbia

August 11th 2010

Dear Prof. Scepanovic,

On behalf of the Organizing committee of the 16th International School of Condensed Matter Physics, the ISCMP 2010 *"Progress in Solid State and Molecular Electronics, Ionics and Photonics"*, which will take place in Varna, BULGARIA between 29th August and 3rd September 2010, I have the pleasure to inform you that your contributions entitled:

***Invited lecture: "INVESTIGATION OF VIBRATIONAL AND ELECTRONIC STATES IN OXIDE
NANOPOWDERS BY SPECTROSCOPIC METHODS"***

by M. Scepanovic, M. Grujic-Brojcin, Z. Dohcevic-Mitrovic and Z. V. Popovic

have been included in the School programme.

We kindly invite you to take part in the work of the School and will be glad to meet you in Varna in the end of August and beginning of September.

We have booked for you a double room for the period August 28th -September 4th, 2010 in the Panorama hotel in the resort St.St. Konstantin and Elena in which the School will be held.

Sincerely yours,

Academician Alexander G. Petrov, PhD, DSc, FBAS
Director, Institute of Solid State Physics
Chairman of 16ISCMP 2010



LANTERNA 2014-I nacionalni naučni skup-nuklearne i druge analitičke tehnike u izučavanju kulturnog nasleđa - zaštita baštine između prirodnih i društvenih naučnih oblasti, Galerija Matice srpske, Novi Sad, 03. novembar 2014.

15. oktobar 2014. godine

dr Mirjana Grujić-Brojčin
Viši naučni saradnik
Institut za fiziku, Univerzitet u Beogradu
Centar za fiziku čvrstog stanja i nove materijale
Pregrevica 118
11080 Zemun

POZIVNO PISMO

Poštovana gospodo Grujić-Brojčin,

Čast mi je i zadovoljstvo da Vas, u ime Naučnog odbora prvog nacionalnog naučnog skupa LANTERNA 2014 (nuklearne i druge analitičke tehnike u izučavanju kulturnog nasleđa - zaštita baštine između prirodnih i društvenih naučnih oblasti), pozovem da u svojstvu predavača po pozivu održite predavanje pod naslovom „Primena Ramanove spektroskopije za proučavanje kulturnog nasleđa: prvi rezultati ispitivanja keramike sa lokaliteta Kale Krševica“. Naučni skup će se održati u Galeriji Matice srpske u Novom Sadu, 3. novembra 2014. godine.

Naučni skup je prilika da se kroz direktne susrete eksperata iz naučnih, tehničko-tehnoloških i društveno-humanističkih oblasti istraživanja istakne multidisciplinarni karakter izučavanja predmeta kulturnog nasleđa.

Radujemo se Vašem učešću.

U ime Naučnog odbora LANTERNE 2014


dr Maja Gajić-Kvašček

Naučni saradnik
Institut za nuklearne nauke Vinča, Beograd, Srbija



Institut za nuklearne nauke Vinča Beograd



Galerija Matice srpske
Novi Sad



Program skupa

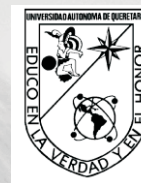
9.00-9.25	Uvodna obraćanja
9.25-10.00	Gostujući predavač -dott. Stefano Ridolfi, Arsmensurae, Rim, Italija (izlaganje na engleskom) Educational Yard, an original way to test instruments and teach physics
Sesija 1: Baština kao društveni resurs	
predsedavajući: dr Dragan Bulatovic, Filozofski fakultet u Beogradu	
Predavanja po pozivu	
10.00-10.25	dr Milan Popadić, Filozofski fakultet u Beogradu Kolonizacija prošlosti: baština kao društveni resurs
10.25-10.50	dr Dubravka Đukanović, Institut za arhitekturu i urbanizam Srbije, Beograd Izazovi održivog razvoja i očuvanje baštine
10.50-11.20	Pauza za kafu
Sesija 2: Naučni resursi za izučavanje kulturne baštine	
predsedavajući: dr Maja Šćepanović, Institut za fiziku, Beograd	
Predavanja po pozivu	
11.20-11.45	dr Ljiljana Damjanović, Fakultet za fizičku hemiju, Beograd Primena metoda fizičko-hemijske analize u očuvanju kulturnog nasleđa
11.45-12.10	dr Radmila Jančić-Heinemann, Tehnološko-metalurški fakultet, Beograd Uloga nauke o materijalima u proučavanju i očuvanju kulturne baštine
12.10-12.35	dr Jonjaua Ranogajec, Tehnološki fakultet u Novom Sadu Science and Education in Cultural Heritage Protection
12.35-13.00	dr Mirjana Grujić-Brojčin, Institut za fiziku, Beograd Primena Ramanove spektroskopije za proučavanje kulturnog nasleđa: prvi rezultati ispitivanja keramike sa lokaliteta Kale Krševica
13.00-13.25	Velibor Andrić, Institut za nuklearne nauke Vinča, Beograd Savremeni trendovi u proučavanju kulturnog nasleđa – neinvazivnost i nedestruktivnost
13.25-14.30	Pauza za ručak

Optical and Vibrational Spectroscopies Symposium: a tribute to Manuel Cardena

August 18-20, Queretaro, Mexico

Invited Speakers

Prof. Manuel Cardona, MPI, Germany
Prof. Jack Rowe, NC State University, USA
Prof. David Snoke, University of Pittsburgh, USA
Prof. Xavier Gonze, Universite Catholique de Louvain, Belgium
Prof. Peter Yu, University of California, Berkeley, USA
Prof. Jorge Serrano, ICREA- UPC, Spain
Prof. Alfonso Muñoz, Universidad de la Laguna, Spain
Prof. Andres Cantarero, Universidad de Valencia, Spain
Prof. Ole Andersen, MPI, Germany
Prof. R. Sooryakumar, Ohio State University, USA
Prof. Reinhard Kremer, MPI, Germany
Prof. Karl Syassen, MPI, Germany
Prof. Fernando Ponce, ASU, USA
Prof. Jose Menendez, ASU, USA
Prof. Luis Felipe Lastras, UASLP, Mexico
Prof. Roberto Escudero, UNAM, Mexico
Prof. Christian Thomsen, TU Berlin, Germany
Prof. Ruben Barrera, UNAM, Mexico
Prof. Ulrich Eckern, Augsburg Univ, Germany
Prof. Gerardo Contreras Puente, IPN, Mexico
Prof. Frederick Smith, City College of New York, USA
Prof. Isaac Hernandez, CINVESTAV, Mexico
Prof. David Lederman, West Virginia Univ, USA
Prof. Zoran Popovic, Physics Institute, Serbia
Prof. Philip Allen, Stony Brook, USA



Organizer: Prof. Aldo H Romero, CINVESTAV, Mexico
Information: homenajemanuel@qro.cinvestav.mx
Place: Universidad Autonoma de Queretaro
Queretaro

Organizing Committee:
Prof. Alfonso Muñoz, Prof. Jorge Serrano,
Prof Mario Rodriguez, Prof. Janet Ledesma

Raman and Infrared spectra
Thermal properties
Superconductivity
Nanostructures
Isotope Effects
Optical characterization
Electronic properties
Semiconductor Physics
Dynamical optical processes
Vibrational Properties
Transport properties

75th Manuel's Birthday

Raman scattering on nanomaterials and nanostructures

Z. V. Popović*, Z. Dohčević-Mitrović, M. Šćepanović, M. Grujić-Brojčin, and S. Aškrabić

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

Received 30 July 2010, revised and accepted 10 September 2010

Published online 11 October 2010

Key words Raman scattering, nano materials, phonon confinement effects, titania and ceria.

This article is dedicated to Manuel Cardona.

The conventional Raman scattering spectroscopy is one of the most used and powerful techniques for characterization of nano-sized materials and structures. By proper analysis of optical mode shift and broadening in nanomaterials based on phonon confinement model, it is possible to deduce about the influence of various effects like particle size and size distribution, strain, change of phonon dispersion, substitutional effects, defect states and nonstoichiometry, electron-phonon coupling. We have demonstrated potentials of this technique in CeO₂ and TiO₂ nanocrystalline systems analyzing their optical phonon properties.

© 2011 WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim

1 Introduction

There are plenty of different microscopic and other techniques which are widely used to study nano-sized materials and structures. In order to map mostly used techniques for nanomaterials characterization we have used the ISI Web of Science data base. There are 58021 “nano” records, for the period 1996–2010 (end of July). The main correlated techniques are as listed in Fig. 1.

According to Fig. 1, the characterization of nanostructured systems is still best accomplished using electron microscopy (TEM, SEM), or by scanning probe techniques (AFM, STM), which provide information on the electronic and morphological properties of materials with nanometer scale resolution. Unfortunately, these techniques work *ex-situ*, often requiring special sample preparation, and can be destructive [1].

Structural characterization of nanomaterials and nanostructures is still run with the conventional X-ray diffraction (XRD) technique, despite limitations existing when going to the nanoscale. This method is on the second place among all other techniques used for nanomaterials characterization. Raman scattering (RS) technique is also very widely used as a powerful tool for characterization of nanosized materials and structures. Beauty and power of RS for materials characterization is:

- No sample preparation or damage
- The ability to measure samples through light transparent material (easy *in-situ* experiments)
- Submicron (in some cases 50 nm) spatial resolution (when coupled with AFM: TERS = tip enhanced RS)
- Very high sensitivity (when coupled with SERRS: surface enhanced resonance Raman spectroscopy)
- Easy use.

* Corresponding author E-mail: zoran.popovic@ipb.ac.rs, Phone: +381 11 3161385, Fax: +381 11 3162 190

ПРИЛОГ 1.3.
(рецензије)



Subject Thank you from J. Opt. - JOPT/391361/PAP/124565
Sender <jopt@iop.org>
Recipient <myramyra@ipb.ac.rs>
Date 08 Jun 2011 17:05

Ref: JOPT/391361/PAP/124565

Dear Dr Grujic-Brojcic

TITLE: Mixing rules and optical properties of an ensemble of II-VI
semiconductor nanoshells
AUTHORS: Dr Rosa M de la Cruz et al

Thank you for your report on the above article. We very much appreciate
your help in refereeing this article for Journal of Optics, and I look
forward to working with you again soon.

Yours sincerely

Stuart Roberts
Publishing Administrator
Journal of Optics

Publishing Team
Stuart Roberts - Publishing Administrator
Gregory Smith - Publishing Editor
Claire Bedrock - Publisher
Rachael Kriefman - Production Editor

Contact Details
E-mail: jopt@iop.org
Fax: +44 (0) 117 9200658

PS Keep up to date with the latest articles published in IOP journals at
<http://iopscience.org>

This email (and attachments) are confidential and intended for the addressee(s) only. If you are not the intended recipient please notify the sender, delete any copies and do not take action in reliance on it. Any views expressed are the author's and do not represent those of IOP, except where specifically stated. IOP takes reasonable precautions to protect against viruses but accepts no responsibility for loss or damage arising from virus infection. For the protection of IOP's systems and staff emails are scanned automatically.

IOP Publishing Limited Registered in England under Registration No 467514. Registered Office: Dirac House, Temple Back, Bristol BS1 6BE England Vat No GB 461 6000 84.
Please consider the environment before printing this e-mail



Subject Re: Review of a paper for PAC journal
Sender Vladimir Srdic <srdicvv@uns.ac.rs>
Recipient Mira Grujic-Brojcin <myramyra@ipb.ac.rs>
Date 14 Apr 2012 19:07

Dear Dr. Grujin Brojcin

Thank you very much for the answer and prepared review of the paper ID PAC-0256, entitled "Semiconducting properties of titanium oxide containing ceramics". I am sure that your comments and suggestions will be very helpful in preparation of revised version of the text.

Kind Regards
Vladimir V. Srdic

Processing and Application of Ceramics
Faculty of Technology
University of Novi Sad
Bul. Cara Lazara 1
21000 Novi Sad
SERBIA
Tel: +381 21 485 3665
Fax: +381 21 450 413
e-mail: srdicvv@uns.ac.rs
web-site: <http://www.tf.uns.ac.rs/publikacije/PAC>
web-site: <http://www.tf.uns.ac.rs/sm2011>

----- Original Message ----- From: "Mira Grujic-Brojcin" <myramyra@ipb.ac.rs>
To: "Vladimir Srdic" <srdicvv@uns.ac.rs>
Sent: Friday, April 13, 2012 10:38 PM
Subject: Re: Review of a paper for PAC journal

Dear Dr. Srdic

Find enclosed the review of the manuscript ID PAC-0256, entitled "Semiconducting properties of titanium oxide containing ceramics". The manuscript will be acceptable after major revision.

Sincerely

Mira Grujic-Brojcin

On 28 Mar 2012 13:01, Vladimir Srdic wrote:

Dear Dr. Grujic Brojcin,

Thank you very much for fast answer and acceptance to prepare review of the manuscript ID PAC-0256, entitled "Semiconducting properties of titanium oxide containing ceramics". We ware looking forward to receive your opinion and comments soon.

Kind Regards
Vladimir V. Srdic

----- Original Message ----- From: "Mira Grujic-Brojcin" <myramyra@ipb.ac.rs>
To: "Vladimir Srdic" <srdicvv@uns.ac.rs>
Sent: Wednesday, March 28, 2012 11:25 AM
Subject: Re: Review of a paper for PAC journal

Dear Editor,

I'm accepting your invitation to review this paper before April 14.

Best regards,

Mira Grujic-Brojchin

On 27 Mar 2012 12:12, Vladimir Srdic wrote:

Dear Dr. Grujic Brojcin,

Manuscript ID PAC-0256, entitled "_Semiconducting properties of titanium oxide containing ceramics_", with Ms. Pura as the corresponding author, has been submitted for the journal - Processing and Application of Ceramics (please visit our web-site at:).

Prof. Abramovic has recommended you as a researcher who is close to the subject of the manuscript - thus, we would like kindly to ask you

to prepare a review of the paper. Please let us know as soon as possible if you will be able to accept our invitation and prepare a review before April 14, 2012. If you are unable to review at this time, we would appreciate you recommending another expert reviewer.

Please find attached the text as a PDF-file and the Reviewer Form.

Best Regards

Vladimir V. Srdic, editor

Faculty of Technology
University of Novi Sad
Bul. Cara Lazara 1
21000 Novi Sad
SERBIA

Tel: +381 21 485 3665

Fax: +381 21 450 413

e-mail: srdicvv@uns.ac.rs

web-site: <http://www.tf.uns.ac.rs/publikacije/PAC>

web-site: <http://www.tf.uns.ac.rs/sm2011>



Subject Thank you for agreeing to review
Sender Donald Schleich <dona1d.schleich@univ-nantes.fr>
Recipient <myramyra@phy.bg.ac.yu>
Date 12 Mar 2010 14:02

REVIEWER INSTRUCTIONS AND DUE DATE

Ms. Ref. No.: MSB-D-10-00261

Title: OPTICAL AND PHOTOCATALYTIC PROPERTIES OF TITANIUM-MANGANESE MIXED OXIDES

Materials Science and Engineering B

Dear Dr. M. Grujic-Brojcin,

Thank you for agreeing to review manuscript number MSB-D-10-00261 for Materials Science and Engineering B.

If possible, I would appreciate receiving your review by Apr 11, 2010.

IMPORTANT NOTE: If you are attaching a file with your review, please ensure that your name is absent/removed from the document properties of the file. Please check this by clicking on 'file' and on 'properties' or 'document properties' before uploading your attachment.

To submit your review, please do the following:

1. Go to this URL: <http://ees.elsevier.com/msb/>

2. Enter these login details:

Your username is: MGrujic-Brojcin-829

If you need to retrieve password details, please go to: http://ees.elsevier.com/msb/automail_query.asp

3. Click [Reviewer Login]

This takes you to the Reviewer Main Menu.

4. Click [Pending Assignments]

5. Click [Submit Recommendation] (in the Actions column)

6. Choose the appropriate recommendation term for the paper e.g. Accept, Revise, Reject

7. Rate the paper by clicking on the appropriate check boxes in the Manuscript Review form underneath

8. Insert your confidential comments to the author (your name will not be released to the author)

9. Enter your comments to the editor (these are not available to the author)

10. Click [Proceed]

11. Click [Edit Review] if you wish to make further changes or [Submit Review to Journal Office] to confirm

12. Click [OK] to confirm your overall recommendation.

For further information on how to submit your recommendation and comments, see: <http://epsupport.elsevier.com/article.aspx?article=1461&p=3>

If you are unable to view the revised manuscript you may need to disable pop up blocker.

In order to disable pop up blocker you must do the following:

1. Go to Tools, pop up blocker and tick disable pop up blocker.

2. If still experiencing problems please check the top of your screen, under your browser box. Internet Explorer displays an Information Bar (just below the address bar) where you can

see information about downloads, blocked pop-up windows, and other activities.

3. If you can view this colour bar, please right click on the bar and select Allow pop up blockers.

4. This Information Bar helps you to avoid potentially harmful files that you might otherwise accept from the Internet.

5. You will need to click on this Information Bar, choose Download File, then return to View Submission to open the file.

6. You can also hold the CTRL key while you are clicking on View Submission or View Revision and again while you are clicking Open on the PDF file.

Thank you in advance for your timely cooperation and for your contribution to the success of Materials Science and Engineering B.

Yours sincerely,

Donald Schleich
Deputy Editor
Materials Science and Engineering B

For further assistance, please visit our customer support site at <http://epsupport.elsevier.com>. Here you can search for solutions on a range of topics, find answers to frequently asked questions and learn more about EES via interactive tutorials. You will also find our 24/7 support contact details should you need any further assistance from one of our customer support representatives.



Subject Regarding our Invitation to review MATCHEMPHYS-D-13-00521
Sender Materials Chemistry and Physics <matchemphys@elsevier.com>
Recipient <myramyra@ipb.ac.rs>
Date 08 Mar 2013 03:03

Ms. Ref. No.: MATCHEMPHYS-D-13-00521
Title: Effect of N and S doping on the performance of commercial TiO₂ powders for dichloroacetic acid degradation
Materials Chemistry and Physics

Dear Dr Mirjana Grujic-Brojcin,

On Mar 06, 2013, I sent you the abstract below, which has been submitted for consideration for publication in Materials Chemistry and Physics. I would be most grateful if you could find the time to read the abstract (appended below) and accept the invitation if you feel you can adequately comment on the papers suitability for publication.

If you are willing to review this manuscript, please click on the link below:

<http://ees.elsevier.com/matchemphys/1.asp?i=271087&l=JNIT6YRD>

If you are unable, please click on the link below. We would appreciate receiving suggestions for alternative reviewers:

<http://ees.elsevier.com/matchemphys/1.asp?i=271088&l=OOT97XJN>

Alternatively, you may register your response by accessing the Elsevier Editorial System for Materials Chemistry and Physics as a REVIEWER using the login credentials below:

<http://ees.elsevier.com/matchemphys/>

Your username is: ZDohcevic-Mitrovic-295

If you need to retrieve password details, please go to: http://ees.elsevier.com/matchemphys/automail_query.asp

If you accept this invitation, I would be very grateful if you would return your review within three weeks of accepting the assignment.

When your review is complete, you can log on again to submit it online.

Thank you very much for your assistance.

Yours sincerely,

Dr. An-Chung Su
Associate Editor
Materials Chemistry and Physics

ABSTRACT:

Commercial Evonik P25 powders were ground with thiourea and urea after annealing treatment. Several characterisation techniques, nitrogen adsorption studies (BET), X-ray diffraction (XRD), X-ray photoelectron spectroscopy (XPS), Scanning electron microscopy (SEM) and Diffuse reflectance spectroscopy (DRS), were employed to determine surface area, crystal phase, morphology, band gap and the nature of the nitrogen and sulphur doping on the TiO₂ surface. The photocatalytic activity of the nitrogen and sulphur doped photocatalysts were evaluated by following dichloroacetic acid mineralisation under solar illumination.

For further assistance, please visit our customer support site at <http://help.elsevier.com/app/answers/list/p/7923>. Here you can search for solutions on a range of topics, find answers to frequently asked questions and learn more about EES via interactive tutorials. You will also find our 24/7 support contact details should you need any further assistance from one of our customer support representatives.



Subject Thank you for reviewing for physica status solidi
Sender <andres.cantarero@uv.es>
Recipient <myramyra@ipb.ac.rs>
Date 09 Jun 2010 09:09

Manuscript title: "Mesoporous CeO₂ nanopowders with different particle sizes"
Author/s: Popovic
Manuscript: number pssc.201000355
Project: PSST 2010
09-Jun-2010

Dear Dr. Brojcin,

Thank you for reviewing the above mentioned manuscript.
Your time and effort is greatly appreciated by the journal editors and by the authors.

Kind regards,

Dr. Andres Cantarero
physica status solidi
andres.cantarero@uv.es

ПРИЛОГ 2.2.

НАУЧНОМ ВЕЋУ ИНСТИТУТА ЗА ФИЗИКУ

Београд, 24.12.2015.

Предмет: изјава руководиоца пројекта о менторству

Потврђујем да др Мирјана Грујић-Бројчин у Центру за физику чврстог стања и нове материјале Института за физику руководи истраживањима везаним за докторске студије мр Данијеле Маринчев.

Предмет ових истраживања је карактеризација TiO_2 и TiO_2/WO_3 превлака и нанопрахова применом метода Раманове и инфрацрвене спектроскопије, као и спектроскопске елипсометрије. Експериментални део истраживања је обављен је у лабораторијама Центра током 2014/2015. године, а нумеричка анализа добијених резултата је у току.

Руководилац пројекта
ИИИ45018



Академик Зоран В. Поповић



Потврда

Др Мирјана Грујић-Бројчин је ментор докторских студија студенткиње Данијеле
Маринчев. Колегиница Маринчев још увек није пријавила тему докторске дисертације.

Београд, 01.12.2015.



Продекан за науку Физичког факултета

Воја Радовановић

The Serbian Ceramic Society
The Academy of Engineering Sciences of Serbia
Institute for Multidisciplinary Research - University of Belgrade
Institute of Physics - University of Belgrade
Vinča Institute of Nuclear Sciences - University of Belgrade

PROGRAMME and the BOOK of ABSTRACTS

2CSCS-2013

2nd Conference of the Serbian Ceramic Society
June 5-7.2013. Belgrade Serbia

Edited by:
Snežana Bošković
Vladimir V. Srdić
Zorica Branković

The Raman spectroscopy of TiO₂/WO₃ coatings formed by plasma electrolytic oxidation

**Danijela Marinčev¹, Mirjana Grujić-Brojčin¹, Stevan Stojadinović²,
Marko Radović¹, Maja Šćepanović¹, and Zorana D. Dohčević-Mitrović¹**

¹ Institute of Physics, University of Belgrade, Belgrade, Serbia

² Faculty of Physics, University of Belgrade, Belgrade, Serbia

The properties of pure TiO₂ and TiO₂/WO₃ coatings formed by plasma electrolytic oxidation (PEO) of titanium in 12-tungstosilicic acid water solution have been studied by Raman spectroscopy. The Raman spectra of TiO₂/WO₃ coatings obtained after 45, 60, 90 and 180s of PEO process, recorded at room temperature, have been compared to the spectra of pure anatase coatings. The decrease of anatase Raman modes intensities has been registered with the increase of PEO process duration. Also, the increasing intensity of WO₃ Raman modes has been ascribed to enrichment of coatings with WO₃ with the increasing time of PEO process. Moreover, the isolated regions of pure WO₃ have been detected by Raman spectroscopy in coatings obtained by 180s of PEO. The results of Raman spectroscopy have been compared to previously obtained results of by X-ray diffraction (XRD).

Univerzitet u Beogradu

Katarina M. Vojisavljević

**Modifikacija strukture i svojstava cink-oksida
indukovana mehaničkom aktivacijom**

**doktorska disertacija
(150 strana)**

Beograd, 2010.

ZAHVALNOST

Doktorska disertacija „Modifikacija strukture i svojstava cink-oksida indukovana mehaničkom aktivacijom“, urađena je u Institutu za multidisciplinarna istraživanja u Beogradu, kao deo aktivnosti na projektu br. 142040 „Savremena metal-oksida elektrokeramika i tanki filmovi“ Ministarstva za nauku i zaštitu životne sredine Republike Srbije.

Posebnu zahvalnost dugujem mentoru dr Tatjani V. Srećković (Institut za multidisciplinarna istraživanja, Beograd), koja me je uvela u naučno-istraživački rad iz oblasti nauke o materijalima, na savesnom rukovođenju, usmeravanju i pružanju niza konstruktivnih sugestija vezanih za ispitivanu problematiku, a koje su u velikoj meri doprinele realizaciji ove disertacije.

Izuzetnu pomoć i podršku pri izradi disertacije pružila mi je doc. dr Aleksandra Rosić (Katedra za kristalografiju, Rudarsko-geološki fakultet, Beograd), kojoj se i na ovaj način zahvaljujem.

Dr Maji Šćepanović (Centar za fiziku čvrstog stanja i nove materijale, Institut za fiziku, Beograd), koja je rukovala delom disertacije vezanim za karakterizaciju metodama Ramanove spektroskopije i fotoluminescencije, dugujem posebnu zahvalnost na izuzetnom angažovanju i pomoći od eksperimentalnog dela, preko analize eksperimentano dobijenih rezultata, do detaljne i iscrpne diskusije i saveta prilikom pisanja. Sva spektroskopska merenja urađena su u Centru za fiziku čvrstog stanja i nove materijale Instituta za fiziku u Beogradu.

S obzirom na složenost problematike obuhvaćene ovom disertacijom istraživanja su pomogli istraživači iz različitih oblasti nauke o materijalima. Posebno se zahvaljujem: dr Slavku Berniku (Institut „Jožef Stefan“, Ljubljana) na mikrostrukturnoj karakterizaciji cink-oksida prahova skenirajućom elektronskom mikroskopijom, dr Mirjani Grujić-Brojčin (Institut za fiziku, Beograd) na pomoći u obradi i tumačenju rezultata vezanih za Ramanovu spektroskopiju, kolegici dr Lidiji Mančić (Institut tehničkih nauka, SANU, Beograd) na nesebičnoj pomoći oko Ritveldove analize cink-oksida prahova i dr Goranu Brankoviću (Institut za multidisciplinarna istraživanja, Beograd) na konstruktivnim sugestijama i savetima.

Ovom prilikom želim da se zahvalim svim prijateljima i kolegama iz Instituta za multidisciplinarna istraživanja, a posebno mojoj porodici, koji su pomogli svojim savetima i bodrenjem da istrajam.

U Beogradu, marta 2010. god.

Katarina Vojisavljević

Raman study of structural disorder in ZnO nanopowders

M. Šćepanović,^{a*} M. Grujić-Brojčin,^a K. Vojisavljević,^b S. Bernik^c
and T. Srećković^b

Raman scattering spectroscopy has been used for the characterization of zinc oxide nanoparticles obtained by mechanical activation in a high-energy vibro-mill and planetary ball mill. Raman modes observed in spectra of nonactivated sample are assigned to Raman spectra of the ZnO monocrystal, while the spectra of mechanically activated samples point out to the structural and stoichiometric changes, depending on the milling time and the choice of equipment. Observed redshift and peak broadening of the E_2^{high} and E_1 (LO) first-order Raman modes are attributed to increased disorder induced by mechanical milling, followed by the effects of phonon confinement due to correlation length decrease. The additional modes identified in Raman spectra of activated ZnO samples are related to the surface optical phonon modes, due to the intrinsic surface defects and presence of ZrO_2 as extrinsic defects introduced by milling in zirconia vials. Copyright © 2009 John Wiley & Sons, Ltd.

Keywords: ZnO nanopowder; Raman scattering; phonon confinement; surface optical phonons

Introduction

The processing of powder particles in high-energy mills, also known as mechanical activation, is a very efficient and relatively inexpensive method for preparation of nanocrystalline ZnO powder, as one of the most promising materials in the family of wide-gap semiconductor nanomaterials.^[1,2] Mechanical activation introduces lattice disorder and extended defects into wurtzite ZnO structure, and the understanding of these changes is of both practical and theoretical interest. Raman scattering can give important information about the nature of the solid on a scale of a few lattice constants.^[3] Therefore, Raman spectroscopy techniques can be used to study the microscopic nature of structural and/or morphological disorder, which are strongly correlated with optical phonons in nanostructures.^[4] In polar semiconductors, such as ZnO, in addition to optical and acoustic phonons, new optical features may appear in Raman spectra at different length dimensions L of nanostructure, compared to the excitation wavelength λ and Bohr exciton radius a_B .^[5] In the case of $a_B \approx L \ll \lambda$ ($L < 10$ nm), the quantum size and confinement effects become important, the bandgap grows, and the optical and electronic properties of nanomaterial differ significantly from its bulk counterpart. On the other side, when $a_B \ll L \ll \lambda$ (10 nm $< L < 100$ nm), the confinement effect is not so relevant, but light scattering is widely influenced by large inner surface, and surface phonon modes appear in Raman spectra between the transversal optical (TO) and longitudinal optical (LO) modes.^[5]

The phonon confinement model (PCM) has been applied for estimation of ZnO nanocrystal^[6,7] and quantum dot^[8] dimensions, as well as the correlation length in ZnO thin films^[9] and ZnO nanoparticles with Zn substituted by Mn^[10] or Co.^[11] The effect of phonon confinement due to nanometric correlation length^[12] on shift and asymmetric broadening of the E_2^{low} ,^[7,11] E_2^{high} ^[6–10] and E_1 (LO)^[6] Raman modes in ZnO has also been studied. The PCM has been usually applied in Campbell and Fauchet form.^[13] Besides, the PCM with particle size distribution has been used to explain

the great asymmetric broadening of the E_2^{high} Raman mode in ZnO quantum dots.^[8] However, significant disagreement among the published results obtained by PCM brings into question the choice of the relevant parameters, which must be supported by the experimental results.

The appearance of surface optical phonon modes in Raman spectra of ZnO nanostructures has been predicted theoretically^[14] and detected experimentally.^[4,15–17] The surface optical mode (SOP) in metal–semiconductor Zn/ZnO core–shell structured nanoparticles, as dominant in the Raman spectrum in the range of $545–565\text{ cm}^{-1}$, was registered by Xu *et al.*,^[15] as well as by Zeng *et al.*^[16] The appearance of this Raman forbidden mode was related to loss of long-range order and symmetry breakdown in ZnO shell. A prominent surface optical phonon mode has also been observed between 549 and 560 cm^{-1} in the Raman spectra of Zn embedded ZnO nanostructure.^[17] A broad shoulder at $\sim 550\text{ cm}^{-1}$, observed in the Raman spectra of As^+ implanted ZnO single crystals, has also been ascribed to the Fröhlich optical phonon mode.^[4] The wavenumber of this Fröhlich mode, originating from the damaged layer, has been calculated by taking into account the plasmon contribution to the dielectric functions of ZnO.^[4] Besides, some Raman features outside the mentioned wavenumber range have also been ascribed to the surface optical phonon modes in ZnO.^[11]

* Correspondence to: M. Šćepanović, Center for Solid State Physics and New Materials, Institute of Physics, Pregrevica 118, 11080 Belgrade, Serbia. E-mail: maja@ipb.ac.rs

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

b Institute of Multidisciplinary Research, Kneza Višeslava 1, 11030 Belgrade, Serbia

c Department for Nanostructural Materials, Jožef Stefan Institute, Jamova 39, 1000 Ljubljana, Slovenia

Defect induced variation in vibrational and optoelectronic properties of nanocrystalline ZnO powders

Maja Šćepanović,^{1,a)} Mirjana Grujić-Brojčin,¹ Katarina Vojisavljević,² and Tatjana Srećković²

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

²*Institute of Multidisciplinary Research, University of Belgrade, Kneza Višeslava 1, 11030 Belgrade, Serbia*

(Received 14 October 2010; accepted 12 November 2010; published online 11 February 2011)

Structural disorder of ZnO nanopowders with mean crystallite size down to 15 nm, produced by mechanical activation in high energy mills, has been analyzed by x-ray diffraction and Raman spectroscopy. The influence of such disorder on optical and electronic properties of activated ZnO nanopowders has been investigated using photoluminescence spectroscopy and spectroscopic ellipsometry. A revised interpretation of the resonant enhancement of the first and second order Raman scattering by the $E_1(\text{LO})$ phonons in highly disorder ZnO nanopowders has been proposed. Detailed analysis of resonant Raman effects in ZnO powders under sub band gap excitation has given valuable information about defect induced electronic states in the band gap of ZnO. Systematic trend in the electron–phonon coupling strength, with the correlation length which depends on lattice disorder in ZnO, has been also demonstrated. © 2011 American Institute of Physics. [doi:10.1063/1.3525987]

I. INTRODUCTION

Nanocrystalline materials are attracting a wide attention, due to their unique physical properties and potential applications. Among these, nanoscaled ZnO has extraordinary importance as a semiconductor material with wide direct band gap and large exciton binding energy at room temperature.¹ The application of ZnO ranges from photocatalysis, via gas sensing to ultraviolet (UV)-light emitters, varistors, solar cells, transparent high-power electronics, electroluminescent devices, surface acoustic wave devices, and piezoelectric transducers.^{2,3} It is well known that the structural, optical, and electronic properties of ZnO nanoparticles depend not only on the particular crystal structure, composition, and morphology of the oxide particles, but also on their defect structure.⁴ Thus, controlling of defects, as a part of materials properties management, becomes one of the most important goals of contemporary nanotechnology. However, defect structure of nanocrystalline ZnO and the influence of particular intrinsic and extrinsic defects on its properties, is not yet fully understood, in spite of the considerable number of papers published in this field.

In our previous investigations^{5,6} we have shown that highly defective nanocrystalline ZnO powder can be prepared by mechanical activation in high energy mills. The influence of microstructural changes induced by ball milling on optical properties of ZnO nanoparticles were investigated by Giri *et al.*⁷ but several questions related to the role of defects were left open. The defects are known to have a significant impact on the structural, optical, and electronic properties of ZnO, and reliable analysis of ZnO defect structure always requires a combination of several analytical techniques. In this paper we applied x-ray diffraction (XRD)

analysis and Raman scattering measurement for structural characterization of defect induced changes in mechanically activated ZnO powders, whereas their optical and electronic properties have been determined by spectroscopic ellipsometry (SE) and photoluminescence (PL) spectroscopy. These techniques allowed us to correlate the structural changes due to the presence of defects and impurities with the changes in vibrational and PL properties and variation in band gap energy in nanocrystalline ZnO. Special attention has been dedicated to the resonant enhancement of Raman scattering, induced by the intrinsic and extrinsic defects in ZnO powders. It has been shown that detailed analysis of resonant Raman effects in ZnO powders under subband gap excitation can give information about defect induced electronic states in the band gap. This investigation also has clearly established the relationship between the electron–phonon coupling (EPC) strength and the correlation length determined by the concentration of mechanically introduced intrinsic defect in ZnO crystal lattice.

II. EXPERIMENTAL

The commercial zinc oxide powder (ZnO, Kemika, 99.96% purity) with particle size between 100 and 500 nm, labeled as ZnO-0, was the starting material in this study. This powder was mechanically activated in a vibromill with steel rings (type MN 954/3, KHD Humboldt Wedag AG) and in a planetary ball-mill (Fritsch Pulverisette 5) with zirconia vessels and balls. The milling was performed in a continual regime in air. The disk rotation speed of 400 rpm and ball-to-powder mass ratio 40:1 have been applied in planetary mill. The powders activated in vibromill for 30 and 300 min of milling time are labeled as ZnO-v-30 and ZnO-v-300, whereas powders activated in planetary mill are assigned as ZnO-p-30 and ZnO-p-300.

^{a)}Electronic mail: maja@ipb.ac.rs.

Structural characterization of mechanically milled ZnO: influence of zirconia milling media

K Vojisljević¹, M Šćepanović², T Srećković¹, M Grujić-Brojčin²,
Z Branković¹ and G Branković¹

¹ Institute of Multidisciplinary Research, Kneza Višeslava 1, 11030 Belgrade, Serbia

² Center for Solid State Physics and New Materials, Institute of Physics, Pregrevica 118, 11080 Belgrade, Serbia

E-mail: katarina@cms.bg.ac.yu (K Vojisljević)

Received 18 August 2008, in final form 3 October 2008

Published 29 October 2008

Online at stacks.iop.org/JPhysCM/20/475202

Abstract

Zinc oxide nanoparticles were obtained by milling in a planetary ball mill with a zirconia milling assembly for up to 5 h in air. The samples were characterized by scanning electron microscopy, x-ray diffraction (XRD) and Raman spectroscopy methods. The deviation of the lattice parameters from single crystal values was related to defect creation and increase of strain inside the hexagonal lattice of milled ZnO nanoparticles. The observed redshift and peak broadening of the major first-order Raman modes were ascribed to the formation of intrinsic defects by mechanical milling combined with the effects of phonon confinement in nanosized powders. To investigate the type of intrinsic defects and impurities introduced during milling, it was necessary to analyze both milled and thermally treated ZnO. After thermal treatment, the intensity of the Raman spectra increased and the peak positions reverted to values similar to those in unmilled ZnO powder, pointing to defect annihilation. XRD patterns of sintered samples confirmed the existence of zirconia impurities and the Rietveld analysis revealed a small amount of zirconium introduced in the ZnO crystal lattice on the Zn sites or interstitial sites. The large influence of those impurities on the micro-Raman spectra of thermally treated samples was observed in this study.

1. Introduction

Zinc oxide (ZnO) is a versatile, multifunctional material and one of the most promising materials in the family of wide-gap semiconductors [1]. Due to its unique properties, such as optical transparency, high piezoelectric properties, chemical, radiation and thermal resistance, it has been extensively used in lot of industrial products (ceramics, rubber additives, pigments) and medical applications [2–5]. Recently, the discovery of the piezoelectric, and photocatalysis properties of ZnO nanostructures has triggered several new applications [6–8]. Various physical and chemical routes have been used to prepare a wide range of ZnO nanostructures, including novel ZnO nanoarchitectures [9]. ZnO has an extremely large exciton binding energy of 60 meV, which allows an efficient excitonic lasing mechanism to operate at room temperature. Therefore, zinc oxide in the form of

pressed powders and polycrystalline films deposited on various substrates attracts a great deal of attention [10].

Milling in high-energy mills is one of the methods for preparation of nanocrystalline powders and, in particular, ZnO powder [11–15]. Different terms are commonly used in the literature to denote the processing of powder particles in high-energy mills, but most frequent are mechanical activation, mechanical milling and mechanical alloying [16]. Mechanical milling is the method most often used in powder obtaining technology, as it is a very efficient and relatively inexpensive method in contrast to chemical (wet and dry) technologies. If the milling assembly is carefully selected, including the milling media and parameters, it is possible to obtain large amounts of powder, with accurate control of particle and crystallite size, amount and types of defects and impurities [16, 17].

Prolonged milling in high-energy mills is necessary for obtaining nanoparticles, but it leads to contamination of

Proceedings of the International School and Conference on Optics and
Optical Materials, ISCOM07, Belgrade, Serbia, September 3–7, 2007

The Effects of Nonstoichiometry on Optical Properties of Oxide Nanopowders

M. ŠĆEPANOVIĆ^a, M. GRUJIĆ-BROJČIN^{a,*},
Z. DOHČEVIĆ-MITROVIĆ^a, K. VOJISAVLJEVIĆ^b,
T. SREĆKOVIĆ^b AND Z.V. POPOVIĆ^a

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

^bCenter for Multidisciplinary Studies of the Belgrade University
Belgrade, Serbia

In this paper we illustrate the change of optical properties of mechanically activated wurtzite ZnO powder and laser synthesized anatase TiO₂ nanopowder due to the nonstoichiometry caused by mechanical activation and/or laser irradiation in vacuum. Both of the investigated materials are widely used in optoelectronics and the examination of their optical properties under different preparation and environmental conditions is of great practical interest.

PACS numbers:

1. Introduction

The high surface-to-volume ratio of nanocrystals suggests that the surface properties have significant effects on their structural and optical properties. This could be related to the presence of gap surface states arising from surface nonstoichiometry, unsaturated bonds, etc. [1]. Therefore the investigation and control of the surface processes is an important step toward understanding the optical properties of oxide nanocrystals.

Optical properties of as prepared and laser irradiated mechanically activated ZnO powder and laser synthesized anatase TiO₂ nanopowder were investigated by photoluminescence (PL) and Raman spectroscopy. The spectra excited by different lines of Ar⁺ and He–Cd lasers at room temperatures in air and vacuum are compared.

2. Experiment

A commercial ZnO powder (Kemika, p.a. 99.96%) was mechanically activated by grinding in a vibro-mill with steel rings. The grinding time was 30

*corresponding author; e-mail: myramyra@phy.bg.ac.yu

The Serbian Ceramic Society
Vinča Institute of Nuclear Sciences, University of Belgrade
Institute for Multidisciplinary Research, University of Belgrade
Institute of Physics, University of Belgrade

PROGRAM AND THE BOOK OF ABSTRACTS

1st Conference of the Serbian Ceramic Society
March 17-18. 2011.

Belgrade, Serbia

1CSCS-2011

Edited by:
Snežana Bošković
Zorica Branković
Jasmina Grbović Novaković

VARIATION IN OPTICAL AND ELECTRONIC PROPERTIES OF ZnO INDUCED BY MECHANICAL MILLING AND THERMAL TREATMENT

Katarina Vojisavljević¹, Maja Šćepanović², Mirjana Grujić-Brojčin², Slavica Savić¹, Jovana Ćirković¹, Tatjana Srećković¹

¹Institute of Multidisciplinary Research, University of Belgrade, Serbia

²Center for Solid State Physics and New Materials, Institute of Physics, University of Belgrade, Serbia

Zinc oxide ceramics have been prepared from ZnO powders obtained by mechanical milling for 300 min in air in different high-energy mills. Structural disorder induced in ZnO powder by mechanical activation (MA) and partial structural ordering observed after proposed thermal treatment (TT) in ZnO ceramic has been characterized by XRD and Raman spectroscopy. The influence of defect creating during MA and TT on optical and electronic properties of ZnO has been analyzed using spectroscopic ellipsometry and photoluminescence spectroscopy. It was found the strong influence of intrinsic and extrinsic defects on band-gap widening and change in PL spectra shape and intensity.

PROPERTY CASTAB

Sanja Martin
Aleksana

¹University of

²Institute for

³Vinca Ins

The low dwell time of investigation h phases in LCC loe cement cas of the LCC spe Cavitation resi surface degrad cavitation resis original surfac can be success

НАУЧНОМ ВЕЋУ ИНСТИТУТА ЗА ФИЗИКУ

Београд, 24.12.2015.

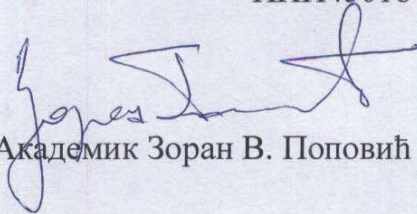
Предмет: изјава руководиоца пројекта о менторству

Потврђујем да је др Мирјана Грујић-Бројчин учествовала у истраживањима везаним за докторску тезу др Соње Ашкрабић под називом "Фонони и дефектна стања у оксидним наноматеријалима" одбрањене 2014. године на Физичком факултету Универзитета у Београду.

Ова теза урађена је у оквиру пројекта ИИИИ45018 (Наноструктурни мултифункционални материјали и нанокомпозити) и ОН171032 (Физика наноструктурних оксидних наоматеријала и јако корелисаних система).

Др Грујић-Бројчин је аутор нумеричког модела и софтвера који су коришћени у обради и тумачењу експерименталних резултата добијених методом Раманове спектроскопије и из ове сарадње и наведене докторске дисертације проистекла су 3 заједничка рада у часописима са ISI листе.

Руководилац пројекта
ИИИИ45018



Академик Зоран В. Поповић

Raman scattering on nanomaterials and nanostructures

Z. V. Popović*, Z. Dohčević-Mitrović, M. Šćepanović, M. Grujić-Brojčin, and S. Aškračić

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

Received 30 July 2010, revised and accepted 10 September 2010

Published online 11 October 2010

Key words Raman scattering, nano materials, phonon confinement effects, titania and ceria.

This article is dedicated to Manuel Cardona.

The conventional Raman scattering spectroscopy is one of the most used and powerful techniques for characterization of nano-sized materials and structures. By proper analysis of optical mode shift and broadening in nanomaterials based on phonon confinement model, it is possible to deduce about the influence of various effects like particle size and size distribution, strain, change of phonon dispersion, substitutional effects, defect states and nonstoichiometry, electron-phonon coupling. We have demonstrated potentials of this technique in CeO₂ and TiO₂ nanocrystalline systems analyzing their optical phonon properties.

© 2011 WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim

1 Introduction

There are plenty of different microscopic and other techniques which are widely used to study nano-sized materials and structures. In order to map mostly used techniques for nanomaterials characterization we have used the ISI Web of Science data base. There are 58021 “nano” records, for the period 1996–2010 (end of July). The main correlated techniques are as listed in Fig. 1.

According to Fig. 1, the characterization of nanostructured systems is still best accomplished using electron microscopy (TEM, SEM), or by scanning probe techniques (AFM, STM), which provide information on the electronic and morphological properties of materials with nanometer scale resolution. Unfortunately, these techniques work *ex-situ*, often requiring special sample preparation, and can be destructive [1].

Structural characterization of nanomaterials and nanostructures is still run with the conventional X-ray diffraction (XRD) technique, despite limitations existing when going to the nanoscale. This method is on the second place among all other techniques used for nanomaterials characterization. Raman scattering (RS) technique is also very widely used as a powerful tool for characterization of nanosized materials and structures. Beauty and power of RS for materials characterization is:

- No sample preparation or damage
- The ability to measure samples through light transparent material (easy *in-situ* experiments)
- Submicron (in some cases 50 nm) spatial resolution (when coupled with AFM: TERS = tip enhanced RS)
- Very high sensitivity (when coupled with SERRS: surface enhanced resonance Raman spectroscopy)
- Easy use.

* Corresponding author E-mail: zoran.popovic@ipb.ac.rs, Phone: +381 11 3161385, Fax: +381 11 3162 190

Low-Frequency Raman Spectroscopy of Pure and La-Doped TiO₂ Nanopowders Synthesized by Sol-Gel Method

M. ŠĆEPANOVIĆ^{a,*}, S. AŠKRABIĆ^a, M. GRUJIĆ-BROJČIN^a, A. GOLUBOVIĆ^a,
Z. DOHČEVIĆ-MITROVIĆ^a, A. KREMENOVIĆ^b AND Z.V. POPOVIĆ^a

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

^bFaculty of Mining and Geology, Laboratory for Crystallography, University of Belgrade, Serbia

Pure and La-doped titania (TiO₂) nanopowders are synthesized by sol-gel technology. The crystallite sizes determined by X-ray diffraction measurements range from 10 to 15 nm. Dependence of structural and morphological characteristics of nanopowders on synthesis conditions and La³⁺ content is investigated by the Raman spectroscopy. Very intensive modes observed in the Raman spectra of all nanopowder samples are assigned to anatase phase of TiO₂. Additional Raman modes of extremely low intensity can be related to the presence of a small amount of brookite amorphous phase in nanopowders, which is in accordance with the results of X-ray diffraction analysis. The particle size distribution in TiO₂ nanopowders was estimated from the low frequency Raman spectra, using the fact that the phonon modes in nanosized TiO₂ observed in the low frequency region ($\omega < 40 \text{ cm}^{-1}$) can be well described by the elastic continuum model, assuming that nanoparticles are of perfect spherical shape and isotropic. The nanosized particle distribution obtained by this method is used for the calculation of the frequency and shape of the most intensive E_g Raman mode in anatase TiO₂ by the phonon confinement model. The calculated broadening of this mode, associated with the particle size distribution, coincides well with the characteristics of E_g mode observed in measured Raman spectra of TiO₂ nanopowders. This confirms the Raman spectroscopy method as a powerful tool for determination of particle size distribution in nanosized materials.

PACS numbers: 81.20.Fw, 81.07.Wx, 78.30.-j, 63.22.-m

1. Introduction

Titanium dioxide (TiO₂) has three polymorphic modifications: rutile (tetragonal, $P4_2/mnm$), anatase (tetragonal, $I4_1/amd$), and brookite (orthorhombic, $Pbca$). All of them have numerous applications as important industrial materials. In recent years, nanosized TiO₂, especially anatase TiO₂, has attracted much attention as key material for photocatalysts [1], dye-sensitized solar cells [2], gas sensors [3] and electrochromic devices [4]. The applications of nanosized anatase TiO₂ are primarily determined by its physicochemical properties such as crystalline structure, particle size, surface area, porosity and thermal stability. The aim of this study is to investigate the variations in anatase structure induced by doping of nanopowders with lanthanum. In our previous paper [5] it was shown that La-doping improves thermal stability of sol-gel synthesized TiO₂ nanopowders. The Raman spectroscopy method is primarily used here to correlate the amount of brookite phase, as well as the particle size and particle size distribution in anatase phase, with the content of La-dopant.

2. Experimental details

TiCl₄ was used as the precursor in the synthesis. The Ti(OH)₄ hydrogel was obtained by hydrolysis of TiCl₄ at 0°C with controlled addition of 2.5 wt.% aqueous ammonia into the aqueous solution of TiCl₄ (0.3 mol/l) and careful control of the pH value of the solution. After aging in the mother liquor for 5 h, filtering and washing out with deionized water, obtained Ti(OH)₄ hydrogel was converted to its ethanol-gel by repeated exchange with anhydrous ethanol for several times. The obtained alcogel was placed in a vessel, dried at 280°C and calcined at temperature of 550°C, and after that converted to the nanoparticles. In the case of La-doped TiO₂, LaCl₃·7H₂O was used.

Powder X-ray diffraction (XRD) was used for the identification of crystalline phases, quantitative phase analysis and estimation of crystallite size and strain. The XRD patterns were collected on a Philips diffractometer (PW1710) employing Cu $K_{\alpha 1,2}$ radiation.

Raman measurements were performed using 514 nm laser line of an Ar⁺/Kr⁺ laser and Jobin Yvon T64000 triple spectrometer system, equipped with confocal microscope and a nitrogen-cooled CCD detector. Low-frequency Raman measurements were performed in the backscattering geometry using the 442 nm line of a He-Cd laser as an excitation source, a Jobin Yvon U1000

* corresponding author; e-mail: maja@phy.bg.ac.yu

RAMAN STUDY OF VANADIUM-DOPED TITANIA NANOPOWDERS SYNTHESIZED BY SOL-GEL METHOD

M. ŠĆEPANOVIĆ

*Center for Solid State Physics and New Materials, Institute of Physics, Pregrevica 118, Belgrade, Serbia
maja@ipb.ac.rs*

S. AŠKRABIĆ

*Center for Solid State Physics and New Materials, Institute of Physics, Pregrevica 118, Belgrade, Serbia
sonask@ipb.ac.rs*

M. GRUJIĆ-BROJČIN

*Center for Solid State Physics and New Materials, Institute of Physics, Pregrevica 118, Belgrade, Serbia
myramyra@ipb.ac.rs*

A. GOLUBOVIĆ

*Center for Solid State Physics and New Materials, Institute of Physics, Pregrevica 118, Belgrade, Serbia
golubovic@ipb.ac.rs*

Z. DOHČEVIĆ-MITROVIĆ

*Center for Solid State Physics and New Materials, Institute of Physics, Pregrevica 118, Belgrade, Serbia
zordoh@ipb.ac.rs*

B. MATOVIĆ

*Institute of Nuclear Sciences "Vinča", 11001 Belgrade, Serbia
mato@vinca.rs*

Z. V. POPOVIĆ

*Center for Solid State Physics and New Materials, Institute of Physics, Pregrevica 118, Belgrade, Serbia
popozor@ipb.ac.rs*

Received 1 September 2009

Revised 30 December 2009

Pure titania (TiO_2) nanopowders and TiO_2 doped with 10 mol % of vanadium ions (V^{3+}) are synthesized by sol-gel method. The dependence of structural characteristics of nanopowders on synthesis conditions is investigated by X-ray diffraction and Raman spectroscopy. Very intensive modes observed in Raman spectra of all nanopowders are assigned to anatase phase of TiO_2 . Additional Raman modes of extremely low intensity which can be related to the presence of small

P.S.A.19.

RAMAN STUDY OF VANADIUM-DOPED TITANIA NANOPOWDERS SYNTHESIZED BY SOL-GEL METHOD

M. Šćepanović¹, M. Grujić-Brojčin¹, S. Aškračić¹, A. Golubović¹,
Z. Dohčević-Mitrović¹, B. Matović², Z.V. Popović¹

¹Center for Solid State Physics and New Materials, Institute of Physics, Belgrade, Serbia

²Institute of Nuclear Sciences "Vinča", Belgrade, Serbia

Pure titania (TiO₂) nanopowders and TiO₂ doped with 10 mol % of vanadium ions (V³⁺) are synthesized by sol-gel technology. The dependence of structural characteristics of nanopowders on synthesis conditions is investigated by X-ray diffraction and Raman spectroscopy. Very intensive modes observed in Raman spectra of all nanopowders are assigned to anatase phase of TiO₂. Additional Raman modes of extremely low intensity which can be related to the presence of small amount of brookite amorphous phase are observed in pure TiO₂ nanopowders. In V-doped nanopowders anatase was the only TiO₂ phase detected. The variations in duration and rate of calcination almost do not influence the Raman spectra of pure TiO₂, but has great impact on Raman modes of anatase, as well as the additional Raman modes related to the presence of vanadium oxides in V-doped samples. In order to estimate the dependence of nanocrystallite size on synthesis conditions and correlate it with the XRD results, the shift and asymmetrical broadening of the most intensive anatase Raman mode ($E_{g(1)}$) are analyzed by phonon confinement model.

P.S.A.20.

HOW TO CHANGE PROPERTIES OF FUNCTIONAL FILMS BY SOL-GEL TECHNIQUE

N. Korobova¹, S. Timoshenkov², O. Jharkova³

¹Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan, ²Moscow Institute of Electronic Technique, Moscow, Russia, ³Lab. of Innovation technologies of microelectronics, Moscow, Russia

The development of new improved type of functional films on the conception of multiphase structure has been carried out in this paper. Metal alkoxide solutions were used for application of thin films by electrophoretic deposition technique. We succeeded in preparation of amorphous, crystalline and composite films. Specific features of the preparation technique were considered. Microstructure of the films was examined as well as their physical properties. TEM analyses reveals that films deposited from aging sols and heat-treated at temperatures 300 - 400°C contain small whiskers and nanocrystallites. The alteration in crystallization behavior of Al₂O₃ whiskers was discussed in terms of aging starting sols before electrophoretic deposition for dielectric films. Superconducting (YBCO and BSCCO) and piezoelectric (BaTiO₃) ultra-fine uniform film preparation has been discussed.

u34



ARISTOTLE
UNIVERSITY
of Thessaloniki



Harvard
University

1st IC4N - 2008

1st International Conference
from Nanoparticles & Nanomaterials
to Nanodevices & Nanosystems

BOOK OF ABSTRACTS

Halkidiki, Greece

June 16-18, 2008

ORGANIZERS:

E.I. Meletis
U. Texas-Arlington, US

E.C. Aifantis
Aristotle University, GR
Michigan Tech, US

E. Kaxiras
Harvard U., US

RAMAN STUDY OF OXYGEN VACANCY BEHAVIOR IN CERIA NANOPOWDERS DOPED WITH Nd, Y AND Gd

S. Aškrabić¹, Z. Dohčević-Mitrović^{1*}, M. Radović¹, M. Šćepanović¹,
M. Grujuć-Brojčin¹, B. Matović² and Z. V. Popović¹

¹ *Institute of Physics, Centre for Solid State Physics and new Materials, Belgrade, Serbia*

² *Institute of Nuclear Sciences 'Vinča', Belgrade, Serbia*

Nanopowders of ceria doped with Nd, Y and Gd at various doping fractions were prepared by self propagating room temperature method. These solid solutions maintain the fluorite crystal structure of pure CeO₂. Creation and behavior of oxygen vacancies, at high temperatures up to 600°C, have been studied by Raman spectroscopy. Beside the F_{2g} mode, two additional modes appear in the Raman spectra of these nanopowders at the frequencies between 550 cm⁻¹ and 600 cm⁻¹. These modes are correlated with the presence of extrinsic (intrinsic) oxygen vacancies. Temperature treatment led to the increased mobility of the vacancies which is best observed in the ceria doped with Gd. While the ceria doped with Nd and Y retain stability after temperature treatment, in the case of Gd doped ceria the phase separation took place. Different Ar⁺ laser lines ($\lambda = 488$ nm, 514.5 nm, 647 nm) were used as an excitation source, to study the structure of the surface and bulk shell of these mixed oxides. The intensities of the two observed defect state modes increase significantly as the excitation line wavelength decreases which implies that a surface layer of the samples contains higher concentration of vacancies and dopants compared to the bulk shell.

Универзитет у Београду
Физички факултет

Магистарски рад

Структурна и вибрациона својства
 $\text{Ce}_{1-x}\text{A}_x\text{O}_{2-y}$ (A=Nd, Gd, Ba) нанокристала

Марко Радовић

Београд, 2008.

Захвалница

Овај магистарски рад настао је у Центру за Физику Чврстог Стања и Нове Материјале и представља мали допринос истраживању које се спроводи у оквиру пројекта 141047 Министарства за Науку Републике Србије под називом "Физика нискодимензионих и нанометарских структура и материјала".

Захваљујем се ментору Др. Зорани Дохчевић-Митровић, под чијим је руководством урађен овај рад, на квалитетној сарадњи, корисним саветима и дискусији током израде магистарског рада.

Захваљујем се проф. Др. Зорану В. Поповићу што ми је омогућио рад на овако интересантној тематици у Центру за Физику Чврстог Стања и нове материјале.

Захваљујем се Др. Маји Шћепановић на помоћи током мерења Раман спектра и на корисним саветима.

Захваљујем се колегиницама и колегама: Мр. Мирјани Грујић-Бројчин, MSc. Соњи Ашкрабић, Мр. Новици Пауновићу и Мр. Дејану Ђокићу на корисним саветима током реализације овог магистарског рада.

Захваљујем се Др. Бранку Матовићу на указаном поверењу и научној сарадњи.

Захваљујем се проф. Др. Зорану Радовићу и проф. Др. Љубиши Зековићу на квалитетним сугестијама приликом израде овог рада.

Захваљујем се свим сарадницима Центра за Физику Чврстог Стања и Нове Материјале и Института за Физику.

Мојим родитељима, Бранимиру и Душанки Радовић, неизмерно сам захвалан на свој љубави коју су ми пружили и на свим лепим стварима које су ме научили.

Посебно се захваљујем Светлани која је мој живот испунила светлошћу.

Марко Радовић

Temperature-dependent Raman study of $\text{Ce}_{0.75}\text{Nd}_{0.25}\text{O}_{2-\delta}$ nanocrystals

Z. D. Dohčević-Mitrović,^{a)} M. Radović, M. Šćepanović, M. Grujić-Brojčin, and Z. V. Popović
Center for Solid State Physics and New Materials, Institute of Physics, Pregrevica 118, 11080
Belgrade, Serbia

B. Matović and S. Bošković
Institute of Nuclear Sciences "Vinča", 11001 Belgrade, Serbia

(Received 20 June 2007; accepted 31 October 2007; published online 16 November 2007)

Raman spectra of Nd doped ceria nanocrystals were measured by gradual heating and cooling over the temperature range of 293–1073 K and analyzed using the phonon confinement model that incorporates inhomogeneous strain and anharmonic effects. We have demonstrated that in nanograins, four-phonon anharmonic processes are more dominant at higher temperatures than size effects. After the heat treatment, Nd doped ceria nanocrystals remain of nanometric range (~ 20 nm) while the concentration of oxygen vacancies is still high in ceria lattice, making this material convenient for solid oxide fuel cells application. © 2007 American Institute of Physics. [DOI: 10.1063/1.2815928]

Cerium dioxide (CeO_2) attracts a lot of interest because of its applications in three-way catalysis,¹ gas sensor devices,² and as electrolyte material in solid oxide fuel cells.^{3,4} Nanosized CeO_2 doped with rare earth elements is a promising solid electrolyte with excellent ionic conductivity at low temperature because of the high oxygen vacancy concentration.^{5,6}

Although in recent years numerous investigations have been performed on the structural^{7–9} and transport properties of doped ceria,^{5,6} we are not aware of any other Raman work aimed to the examination of temperature-induced changes on the vibrational properties in these materials. In the present study, we investigated the temperature dependence of the Raman spectra of $\text{Ce}_{0.75}\text{Nd}_{0.25}\text{O}_{2-\delta}$ nanocrystals. The presence of oxygen vacancy Raman modes after heat treatment implies that Nd doped ceria can be a useful electrolyte material for fuel cells. High-temperature x-ray diffraction (HTXRD) measurements were performed in order to investigate the stability of this system and to estimate the particle size.

The $\text{Ce}_{0.75}\text{Nd}_{0.25}\text{O}_{2-\delta}$ nanocrystals were synthesized using self-propagating room temperature synthesis. The detailed powder preparation procedure has been described previously.¹⁰ HTXRD measurements were carried out on Philips X'pert Pro XRD unit equipped with Anton Paar HTK attachment, in static air, using $\text{Co K}\beta$ radiation.

Raman experiments were performed in the backscattering configuration using Jobin Yvon T64000 spectrometer and TS1500 Linkam microscope heating stage. The Raman spectra were measured with the 514.5 nm Ar^+ laser line.

In Fig. 1 are displayed Raman spectra of the $\text{Ce}_{0.75}\text{Nd}_{0.25}\text{O}_{2-\delta}$ sample at room temperature (RT), during the heating (circles) and after gradual cooling (dashed lines) down to room temperature.

In CeO_2 nanocrystals, F_{2g} Raman mode¹¹ at 464 cm^{-1} shifts to lower frequencies with pronounced asymmetrical broadening depending on the particle size.¹² In $\text{Ce}_{0.75}\text{Nd}_{0.25}\text{O}_{2-\delta}$ sample, this mode, at RT, is positioned at about 450 cm^{-1} . With temperature increase the F_{2g} mode

shifts to lower frequencies and becomes less asymmetric while the linewidth continuously increases. Such a behavior is attributed to the presence of anharmonicity in the vibrational potential energy due to the decay of the optical phonon to two or three acoustic phonons.^{12,13} The temperature dependence of the Raman mode frequency and linewidth, including three- and four-phonon anharmonic processes is¹³

$$\begin{aligned}\omega(T) &= \omega_0 + C \left[1 + \frac{2}{e^x - 1} \right] + D \left[1 + \frac{3}{e^y - 1} + \frac{3}{(e^y - 1)^2} \right] \\ &= \omega_0 + \Delta\omega(T),\end{aligned}\quad (1)$$

$$\begin{aligned}\Gamma(T) &= \Gamma_1 + A \left[1 + \frac{2}{e^x - 1} \right] + B \left[1 + \frac{3}{e^y - 1} + \frac{3}{(e^y - 1)^2} \right] \\ &= \Gamma_1 + \Delta\Gamma,\end{aligned}\quad (2)$$

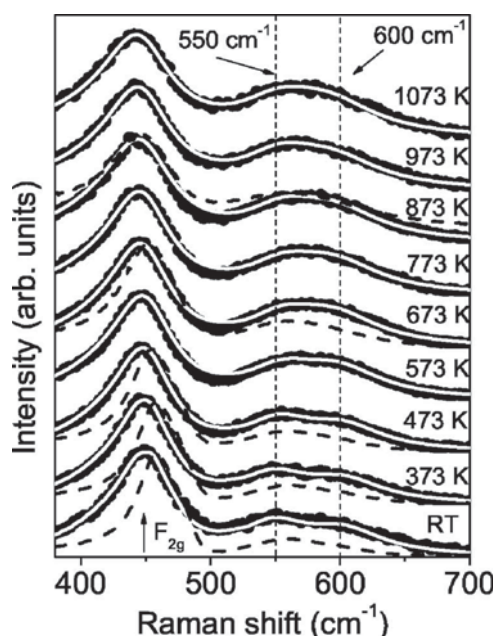


FIG. 1. Raman spectra of $\text{Ce}_{0.75}\text{Nd}_{0.25}\text{O}_{2-\delta}$ sample obtained upon heating (circles) and cooling (dashed lines). The solid lines are calculated spectra using PCM model.

^{a)}Electronic mail: zordoh@phy.bg.ac.yu

UDK 677.026.34:553.689

Raman Study Of Ba-Doped Ceria Nanopowders

M. Radović^{1*)}, Z. Dohčević-Mitrović¹, M. Šćepanović¹, M. Grujić-Brojčin¹,
B. Matović², S. Bošković², Z. V. Popović¹

¹Institute of Physics, Center for Solid State Physics and New Materials, Pregrevica
118, P.O. Box 68, 11080 Belgrade, Serbia,

²Institute of Nuclear Sciences 'Vinca', 11001 Belgrade, Serbia

Abstract:

A series of $Ce_{1-x}Ba_xO_{2-y}$ ($5 \leq x \leq 0.20$) nanometric powders were synthesized by self-propagating room temperature synthesis. XRD and Raman scattering measurements were used to characterize the samples at room temperature. All the samples are solid solutions with fluorite type structure with an average crystallite size about 5 nm. The redshift and asymmetric broadening of the Raman F_{2g} mode can be well explained with combined confinement and strain effects because of the nanocrystalline powders nature. The appearance of the additional peaks at $\sim 560 \text{ cm}^{-1}$ and $\sim 600 \text{ cm}^{-1}$, are attributed to extrinsic and intrinsic O^{2-} vacancies in ceria lattice. Raman spectra of temperature treated $Ce_{0.80}Ba_{0.20}O_{2-\delta}$ sample revealed the instability of this system.

Keywords: Ba doped ceria nanopowders, XRD method, Raman scattering, phase separation

1. Introduction

Cerium dioxide is of interest because of its multiple applications such as catalysis in vehicle emissions-control systems [1], high storage capacitors [2], for high Tc superconducting structures [3], and for optical devices [4]. Recently, ceria based solid solutions have gained an increasing amount of attention due to their potential use as electrolyte material in solid oxide fuel cells [5] (SOFCs). Optimization of SOFCs, to operate at reduced temperatures can be performed with use of electrolyte materials, which have high ionic conductivity at moderate temperatures.

Monodisperse cerium nanoparticles have higher ionic conductivities than bulk material, due to the properties related to their nanostructured nature. Nanosized ceria doped with oxides of di- or trivalent metals exhibits high ionic conductivity at intermediate temperatures (400-700 °C) and is a promising candidate for electrolyte SOFCs materials. Whenever the Ce^{4+} ions are replaced with di- or trivalent rare earth ions large density of oxygen vacancies are formed in ceria lattice enhancing the ionic conductivity of these materials [6,7]. The ionic conductivity significantly depends on the ionic radius and the concentration of the dopant too [8,9].

In the present work we described briefly the SPRT method as a possible method for preparing Ba-doped ceria nanopowders. To the best of our knowledge this method is for the first time used to synthesize the $Ce_{1-x}Ba_xO_{2-y}$ ($5 \leq x \leq 0.20$) solid solutions. The influence of

*) Corresponding author: marrad@phy.bg.ac.yu

NENAD Ž. LAZAREVIĆ
ZORANA D.
DOHČEVIĆ-MITROVIĆ
MIRJANA U.
GRUJIĆ-BROJČIN
MAJA J. ŠČEPANOVIĆ
MARKO B. RADOVIĆ
ZORAN V. POPOVIĆ

Institut za fiziku, Centar za fiziku
čvrstog stanja i nove materijale,
Beograd, Srbija

NAUČNI RAD

UDK 543.424.2:620.1:661.865.5:546.655

DOI: 10.2298/HEMIND0903221L

DEFEKTNA STANJA U NANOKRISTALIMA $\text{Ce}_{0,85}\text{Nd}(\text{Gd})_{0,15}\text{O}_{2-\delta}$ PROUČAVANA METODOM RAMAN SPEKTROSKOPIJE*

Metodom Raman spektroskopije proučavane su defektne strukture vezane za svojstvene i uvedene vakancije u nanokristalima $\text{Ce}_{0,85}\text{Nd}(\text{Gd})_{0,15}\text{O}_{2-\delta}$ pri temperaturnom tretmanu. Ustanovljeno je da efekat aglomeracije ima veoma veliku ulogu na stehiometriju $\text{Ce}_{0,85}\text{Nd}(\text{Gd})_{0,15}\text{O}_{2-\delta}$, odnosno da se pri promeni površinskog i voluminoznog sloja nanokristala menja koncentracija kao i tip defektnih struktura. Proučavanje ovih struktura je veoma važno sa aspekta primene dopiranog cerijum dioksida kao elektrolita u čvrstim gorivnim ćelijama.

Poslednjih godina cerijum-dioksid se sve više proučava teorijski i eksperimentalno zbog veoma široke primene u industriji i medicini. Posebno se ističe primena ovog materijala kao elektrolita u čvrstim gorivnim ćelijama, zbog dobre jonske provodnosti na nižim temperaturama (400–800 °C), te je od velikog značaja proučavanje ponašanja kiseoničnih vakancija na radnoj temperaturi čvrstih gorivnih ćelija [1,2]. U katalizatorskoj primeni koristi se osobina oksida cerijuma da otpušta kiseonik i formira kiseonične vakancije u kiseonikom siromašnim sredinama (redukcija) i da skladište kiseonik popunjavanjem vakancija (oksidacija) u sredinama bogatim kiseonikom čime se reguliše odnos kiseonik-gorivo. Ovaj efekat je posledica međusobne transformacije dva cerijumova oksida, CeO_2 i Ce_2O_3 , u zavisnosti od spoljašnje koncentracije kiseonika [3,4]. Transformacija oksida je dominantna u površinskom sloju nanokristala te je od posebnog značaja proučavanje nano-čestica kod kojih je odnos površinskog i zapreminskog dela veliki. Dodatno se uvođenjem dopanta, trovalentnih jona teških zemalja, i formiranjem uvedenih vakancija može izvršiti kontrola oksido-redukcionih procesa u gorivnim ćelijama i povećati jonska provodnost.

U ovom radu smo ispitivali ponašanje svojstvenih i uvedenih vakancija kod nanokristala cerijum-dioksida dopiranog sa 15% Nd ($\text{Ce}_{0,85}\text{Nd}_{0,15}\text{O}_{2-\delta}$) i 15% Gd ($\text{Ce}_{0,85}\text{Gd}_{0,15}\text{O}_{2-\delta}$) tokom procesa grejanja od sobne temperature do 800 °C i tokom procesa postepenog hlađenja do sobne temperature, koristeći metod Raman spektroskopije.

EKSPERIMENTALNI DEO

Nanokristalni uzorci $\text{Ce}_{0,85}\text{Nd}_{0,15}\text{O}_{2-\delta}$ i $\text{Ce}_{0,85}\text{Gd}_{0,15}\text{O}_{2-\delta}$ pripremljeni su samo-propagirajućom metodom na sob-

noj temperaturi (*self-propagating room temperature synthesis*) [5]. Raman merenja su izvršena na mikro-Raman sistemu Jobin Yvon 64000 koristeći Ar^+ laser talasne dužine 514,5 nm u vazduhu. Raman merenja na povišenim temperaturama (od sobne temperature do 800 °C) obavljena su uz pomoću sistema Linkam HTGS 600 i TS 1500. Temperaturna merenja su vršena sa korakom od 100 K. Površina uzorka $\text{Ce}_{0,85}\text{Gd}_{0,15}\text{O}_{2-\delta}$ snimljena je mikroskopom atomskih sila Omicron B002645 SPM Probe VT AFM 25 u bezkontaktnom modu (NC-AFM). Sva merenja su izvršena u visokom vakuumu (10^{-10} mbar).

PRIKAZ REZULTATA I DISKUSIJA

Stehiometrijski CeO_2 je kubične fluoritne strukture sa četiri atoma cerijuma i osam atoma kiseonika po elementarnoj ćeliji. U njemu cerijum formalno ima valencu +4. Kao prvi element u periodnom sistemu sa delimično popunjenom f-orbitalom ($4f^1$), cerijum ima sposobnost da lokalizuje jedan 4f elektron i pređe u stanje sa valencom +3 uz određenu energetska dobit. Sam proces nastanka kiseonične vakancije odgovara kvantnom efektu lokalizacije 4f elektrona cerijuma. Kada atom kiseonika napusti rešetku u p traci kiseonika ostaju dva suvišna elektrona koja prelaze u najniže nepopunjeno stanje, a to je 4f traka cerijuma [3,4]. U praksi je ustaljeno da se za računanje položaja Raman modova kiseoničnih vakancija koriste strukture prikazane na slici 1.

Struktura M_4O_v podrazumeva da su najbliži susedi vakancija metalni joni, dok su u strukturi M_6O_v najbliži susedi kiseonični joni [6]. Zbog očuvanja elektro neutralnosti, a imajući u vidu sposobnost cerijuma da prilagodi strukturu lokalnom okruženju, jasno je da će kod dva jona cerijuma doći do lokalizacije 4f elektrona te će se naći u stanju +3. Izbor ova dva jona je sa simetrijskog aspekta potpuno proizvoljan. Služeći se analogijom dolazi se do sličnih struktura i u slučaju vakancija izazvanih uvođenjem trovalentnih dopanata retkih zemalja, a pod pretpostavkom da u okviru elementarne ćelije ne dolazi do narušenja fluoritne strukture već samo do zamene jona cerijuma dopantima.

*Rad saopšten na skupu „Sedmi seminar mladih istraživača“, Beograd, 22–24. decembar 2008.

Autor za prepisku: N. Lazarević, Centar za fiziku čvrstog stanja i nove materijale, Institut za fiziku, Pregrevica 118, 11080 Beograd, Srbija.

E-pošta: nenadl@phy.bg.ac.rs

Rad primljen: 22. decembar 2008.

Rad prihvaćen: 4. februar 2009.

RAMAN STUDY OF ANHARMONICITY AND PHASE SEPARATION IN $\text{Ce}_{0.85}\text{Gd}_{0.15}\text{O}_{2-x}$ NANOPOWDER

Z. D. Dohčević-Mitrović¹, Z. V. Popović¹, M. J. Šćepanović¹, M. U. Grujić-Brojin¹,
S. B. Bošković², B. M. Matović² and M. Radović¹

¹Institute of Physics, Centre for Solid State Physics and new Materials, Pregrevica 118, P.O. Box 68, 11080 Belgrade, Serbia

²Institute of Nuclear Sciences 'Vinča', 11001 Belgrade, Serbia

ABSTRACT

Among the electrolyte materials that have been widely employed in the fuel cells ultrafine ceria (CeO_2) powder represents an important material due to the cerium's ability to change valence states and intrinsic oxygen vacancies can be produced in CeO_2 lattice. Ceria doped with rare earth oxides is a promising candidate for SOFC because it exhibits higher ionic conductivity at lower temperatures [1]. Nanometric $\text{Ce}_{0.85}\text{Gd}_{0.15}\text{O}_{2-x}$ powder was synthesized by self propagating room temperature synthesis (SPRT) [2]. The crystal phase of fluorite type was identified using X-ray diffraction. The properties and phase transformation of doped ceria nanopowders as a function of temperature were examined by Raman spectroscopy over the temperature range 293-1100 K (Fig. 1). The contribution of three- and four-phonon anharmonic processes to the frequency and bandwidth was investigated (Fig. 2). After annealing the Raman mode became narrow but asymmetrical. By deconvolution using Lorentz-line profile technique we have found that this mode consists of two modes with frequencies of 464 cm^{-1} and 487 cm^{-1} (Fig. 3). This result confirms that phase separation took place i. e. CeO_2 and Gd_2O_3 phases were formed [3].

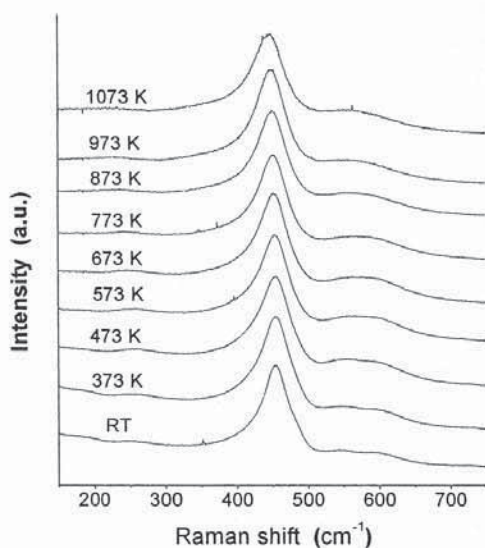


Fig. 1

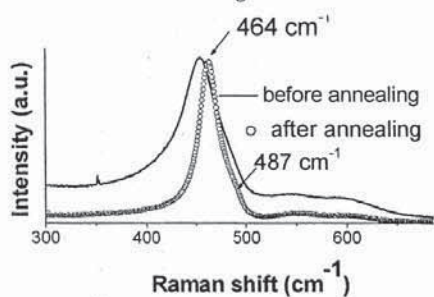


Fig. 3

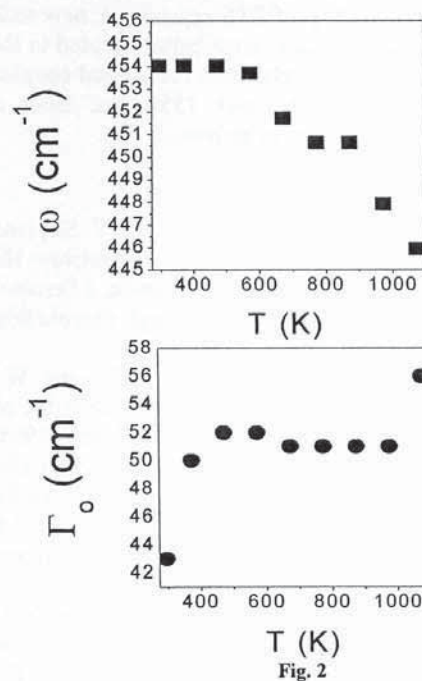


Fig. 2

References:

- [1] T. Matsui, M. Inaba, A. Mineshige, Z. Ogumi, Solid State Ion. **176** (2005) 647
- [2] S. Bošković, D. Djurović, Z. Dohčević-Mitrović, Z. Popović, M. Zinkevich and F. Aldinger, J. Power Sources **145** (2005) 237
- [3] Z. V. Popović, Z. Dohčević-Mitrović, M. J. Konstantinović, M. Šćepanović, J. Raman Spectrosc. (in press, DOI: 10.1002/jrs1696)

**6-P-068 RAMAN STUDY OF BA-DOPED CERIA
NANOPOWDERS**

*M. GRUJIĆ-BROJČIN, Z. DOHČEVIĆ-MITROVIĆ, M. ŠĆEPANOVIĆ, B.
MATOVIĆ*, S. BOŠKOVIĆ*, M. RADOVIĆ AND Z. V. POPOVIĆ*

*Institute of Physics, Centre for Solid State Physics and new Materials,
Pregrevica 118,*

P.O. Box 68, 11080 Belgrade, Serbia, myramyra@phy.bg.ac.yu

** Institute of Nuclear Sciences 'Vinca', 11001 Belgrade, Serbia and
Montenegro, mato@vin.bg.ac.yu*

A series of nanometric ceria powders doped with Ba ($\text{Ce}_{1-x}\text{Ba}_x\text{O}_{2-y}$, $0 \leq x \leq 0.20$) were synthesized by room temperature reaction between metallic nitrates and sodium hydroxide. XRD and Raman scattering measurements were used to characterize the samples at room temperature. XRD measurements showed that single-phase fluorite type structure of CeO_2 were formed in all investigated ranges. The average crystallite size, calculated from Scherrer formula was approximately 4 nm. The variation of the lattice parameter was studied and correlated with the amount of Ba dopant. The strong shift (to lower energies) and asymmetric broadening of the Raman F_{2g} mode could be well explained with a combination of size and strain effect due to the nanocrystalline powders nature. The additional changes in the Raman spectra, i.e. the appearance of the extra-peak at $\sim 600 \text{ cm}^{-1}$, is attributed to O^{2-} vacancies introduced into ceria lattice when Ce^{4+} ions are substituted by divalent Ba^{2+} ions.

1st IC4N - 2008

1st International Conference
from Nanoparticles & Nanomaterials
to Nanodevices & Nanosystems

BOOK OF ABSTRACTS

Halkidiki, Greece

June 16-18, 2008

ORGANIZERS:

E.I. Meletis
U. Texas-Arlington, US

E.C. Aifantis
Aristotle University, GR
Michigan Tech, US

E. Kaxiras
Harvard U., US

RAMAN STUDY OF OXYGEN VACANCY BEHAVIOR IN CERIA NANOPOWDERS DOPED WITH Nd, Y AND Gd

S. Aškračić¹, Z. Dohčević-Mitrović^{1,*}, M. Radović¹, M. Šćepanović¹,
M. Grujuć-Brojčin¹, B. Matović² and Z. V. Popović¹

¹ *Institute of Physics, Centre for Solid State Physics and new Materials, Belgrade, Serbia*

² *Institute of Nuclear Sciences 'Vinča', Belgrade, Serbia*

Nanopowders of ceria doped with Nd, Y and Gd at various doping fractions were prepared by self propagating room temperature method. These solid solutions maintain the fluorite crystal structure of pure CeO₂. Creation and behavior of oxygen vacancies, at high temperatures up to 600°C, have been studied by Raman spectroscopy. Beside the F_{2g} mode, two additional modes appear in the Raman spectra of these nanopowders at the frequencies between 550 cm⁻¹ and 600 cm⁻¹. These modes are correlated with the presence of extrinsic (intrinsic) oxygen vacancies. Temperature treatment led to the increased mobility of the vacancies which is best observed in the ceria doped with Gd. While the ceria doped with Nd and Y retain stability after temperature treatment, in the case of Gd doped ceria the phase separation took place. Different Ar⁺ laser lines ($\lambda = 488$ nm, 514.5 nm, 647 nm) were used as an excitation source, to study the structure of the surface and bulk shell of these mixed oxides. The intensities of the two observed defect state modes increase significantly as the excitation line wavelength decreases which implies that a surface layer of the samples contains higher concentration of vacancies and dopants compared to the bulk shell.

A Global Road Map for Ceramic Materials and Technologies Forecasting the future of Ceramics.....

The Lamberti Tower, an exquisite example of the Romanesque period, dominates the city of Verona from a height of 83 metres standing next to the "Comune" Town Hall.
The construction dates back to 1172 and was completed in 1464 with an elegant belfry from which you can enjoy a breathtaking view

International Ceramic Federation

2nd INTERNATIONAL CONGRESS ON CERAMICS



Promoted by
European Ceramic Society



and
Ceramic Society of Japan
American Ceramic Society

organized in cooperation with
Italian Ceramic Society

VERONA
June 29 - July 4, 2008
Palazzo della Gran Guardia

www.ICC2.org

2nd INTERNATIONAL CONGRESS ON CERAMICS Presidency Board

Gian Nicola Babini
President 2nd ICC
ECeS - Italy 2008

Stephen Freiman
President 1st ICC
ACeS - Toronto 2006

Koichi Niihara
President 3rd ICC
Ceramic Society of Japan - Japan 2010

Gary Messing
President 4th ICC
American Ceramic Society - USA 2012

The *ICF-International Ceramic Federation* endorses and promotes these congresses and guarantees their natural development exploiting the peculiarities of the several regions of the world where the Congress takes place every two years.

The ICC2 in Verona is promoted by

European Ceramic Society (President Derek Thompson - President-Elect Jürgen Heinrich)
Ceramic Society of Japan (President Teruyoshi Hiraoka)
American Ceramic Society (President Katherine Faber)

and it is organized in cooperation with

Italian Ceramic Society (President Paolo Zannini)

Committees (in progress)

- International Advisory Committee
- Road Map Editors Committee
- Organizing Committee

Vision

BE PART OF HISTORY IN THE MAKING!

Shape the future by:

- Exchanging ideas with the invited speakers
- Sharing your ideas in interactive workshop sessions
- Presenting your work and vision
- Exhibiting or viewing the latest commercially available materials and equipment

The first Edition of the **International Ceramic Congress**, held in Toronto in June 2006, illustrated the present situation in detail. At that time, the newly created road map was observing the "ceramic world" through the American Ceramic Society's eyes.

This second edition will update the road map of ICC1 and look into the European situation with reference to diversification and complexity deriving from more than 25 Countries represented in the European Ceramic Society.

All the same, this event aims to privilege the links with the other realities in ceramics, like China, Korea and South-East Asia, Central and Southern America, in order to favour the participation of the Ceramic Societies of these Countries, in compliance with Statute of the International Ceramic Federation.

The **Congress Program** is designed to address ceramic-based materials to the technologies of tomorrow, culminating in a global roadmap that will contain perspectives and future trends.

6 themes, including materials science/processing/properties of traditional and advanced ceramics, ceramic-based composites, glass, cements, were selected in order to define the Session schedules.

The program offers opportunities for business and technology leaders in the ceramic-related fields to come together for debate of critical issues that face the community.

Key note lectures, contributed papers and **invited talks** will present policy, scientific and technological state-of-the-art, application trends and industrial perspectives for the R&D and productive sectors.

Everyone can contribute to the set up of the Global Roadmap. You can present a poster on the most recent achievements related to future technologies and applications.

ICC2 devotes particular attention to the **Corporate Participation**, for the fundamental role of business leaders and technology experts as **invited** in the plenary sessions and in the participation at the **Exhibition**. This is an excellent opportunity for Companies to show technologies, products, services.

The Conference Sessions will be enriched by **Satellite Events (Round Tables, Meetings on Specific Topics, a parallel Career Session)**. These initiatives are in progress and further developments will be issued on the web site.



2nd INTERNATIONAL CONGRESS ON CERAMICS

2nd INTERNATIONAL CONGRESS ON CERAMICS

Wednesday, July 2; 5.00 - 7.00 pm Location: Room Poster

5-P-41. Water-based tape casting and co-sintering of bi-layers for SOFC applications.

M. Cologna, V. M. Sglavo: Dip. Di Ingegneria dei Materiali e Tecnologie Industriali, Università di Trento - Trento - Italy;
M. Bertoldi: SOFCpower S.r.l. - Mezzolombardo - Italy.

5-P-43. CeO₂-CuO cermet type anodic materials for Intermediate temperature SOFC.

G. Velciu, Cr. Seitan: National Research&Development Institute for Electrical Engineering ICPE-CA - Bucharest - Romania; **M. Preda, A. Melinescu:** Politehnica University Bucharest - Applied Chemistry and Material Science Faculty - Bucharest - Romania.

5-P-44. Gadolinia doped ceria water-based inks for intermediate temperature solid oxide fuel cells.

A. Sanson, P. Mangifesta, E. Roncari: ISTEC - CNR - Faenza - Italy.

5-P-47. Zinc oxide addition in solid oxide fuel cell anodes.

D. Zanetti de Florio: Universidade Federal do ABC - Santo André, Brazil; **F. C. Fonseca:** Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares - São Paulo - Brazil; **A. S. Ferlauto:** Universidade Federal de Minas Gerais - Belo Horizonte - Brazil.

5-P-48. Oxygen vacancy study in Ce_{0.75}Nd(Y)_{0.25}O₂- nanocrystals by raman and XPS spectroscopy.

Z. Dohcevic-Mitrovic, M. Radovic, M. Scepanovic, M. Grujic-Brojcin, Z. V. Popovic: Institute of Physics, Centre for Solid State Physics and new Materials - Belgrade - Serbia; **L. Mirengi:** ENEA - Casaccia, Roma - Italy; **S. Boskovic:** Institute of Nuclear Sciences 'Vinca' - Belgrade - Serbia.

5-P-49. Solid-state synthesis of fine barium cerate powders.

V. Buscaglia, M. Viviani, M. T. Buscaglia: IENI-CNR - Genoa - Italy; **A. Bassano, P. Nanni:** Dept. Of Process and Chemical Engineering, University of Genoa - Genoa - Italy.

5-P-50. Synthesis and characterization of La_{1-x}Sr_xFeO₃ powders through a polymeric precursor route using microwave heating.

A. Gaki, Ch. Karavagelis, P. Pandis, Ch. Ftikos, G. Kakali: National Technical University of Athens - Athens - Greece.

5-P-51. Synthesis and characterization of La_{1-x}Sr_xMnO₃ powders through a modified Pechini technique.

G. Kakali, A. Gaki: National Technical University of Athens NTUA - Athens - Greece; **R. Wiglusz, D. Hrenial, W. Strek:** Polish Academy of Sciences - Wroclaw - Poland.

5-P-52. Ni/Al₂O₃/Fe₂O₄ catalysis methane steam reforming: effect of heating conditions in the combustion reaction process.

L. Souto Neiva, L. Gama: Federal University of Campina Grande - Campina Grande - Brazil; **H. Martins Carvalho Andrade:** Federal University of Bahia - Salvador - Brazil; **R. H. Goldshmidt A. Kiminami:** Federal University of São Carlos - São Carlos - Brazil; **A. C. Figueiredo de Melo Costa:** Federal University of Campina Grande - Campina Grande - Brazil.

5-P-53. Research of ITSOFC in SICCAS.

T.-Lian Wen, S. Wang, Shanghai Institute of Ceramics, CAS, China.

5-P-71. Effect of pore former addition on NIO/YSZ anode microstructure and redox tolerance of anode supported solid oxide fuel cells.

A.R. Contino, V.M. Sglavo: DIMTI, Università degli Studi di Trento - Trento - Italy; **D. Montinaro, S. Modena, M. Bertoldi:** SOFCpower S.r.l. - Trento - Italy.

With the compliments of



ACIMAC

Association of Italian Manufactures of
Machinery and Equipment for Ceramics



ACIMAC

Raman study of the variation in anatase structure of TiO₂ nanopowders due to the changes of sol–gel synthesis conditions

A. Golubović · M. Šćepanović · A. Kremenović ·
S. Aškrabić · V. Berec · Z. Dohčević-Mitrović ·
Z. V. Popović

Received: 18 August 2008 / Accepted: 25 November 2008 / Published online: 10 December 2008
© Springer Science+Business Media, LLC 2008

Abstract TiO₂ nanopowders were produced by sol–gel technique under different synthesis conditions. XRD results have shown that obtained nanopowders are in anatase phase, with the presence of a small amount of highly disordered brookite phase, whereas nanocrystallite size and amount of brookite slightly depend on sol–gel synthesis conditions. Raman measurements confirm these results. The analyses of the shift and width of the most intensive anatase E_g Raman mode by phonon confinement model suggest that anatase crystallite size should be in the range between 11 and 15 nm, what is in excellent correlation with XRD results. Obtained results have shown that Raman spectroscopy is a highly sensitive method for the estimation of anatase crystallite size as well as brookite content in TiO₂ nanopowders synthesized by variable sol–gel synthesis conditions.

Keywords Nanostructures · Sol–gel synthesis · X-ray diffraction · Raman spectroscopy

Abbreviation

XRD X-ray diffraction

PCM Phonon confinement model

JCPDS Joint committee on powder diffraction standards

1 Introduction

Titanium dioxide (TiO₂) is an important industrial material as a main component of paints, pigments, a variety of glass products, biomedical implants and in cosmetics [1, 2]. It has been also used for optical coatings, beam splitters and anti-reflection coatings because of its high dielectric constant and refractive index. Pure TiO₂ has three polymorphs: rutile (tetragonal, $P4_2/mnm$), anatase (tetragonal, $I4_1/amd$), and brookite (orthorhombic, $Pbca$). Recently, nanosized anatase TiO₂ has attracted much attention for its numerous applications as key material for photocatalysts [3], dye-sensitized solar cells [4], gas sensors [5] and electrochromic devices [6]. Furthermore, TiO₂ nanocrystals are non-toxic compounds and can be candidate for the biological applications [7]. The applications of nanosized anatase TiO₂ are primarily determined by its physicochemical properties such as crystalline structure, particle size, surface area, porosity and thermal stability. Proper control of these properties, especially crystalline structure depending on the preparation conditions of nanosized TiO₂, represents some of the key issues in this area.

Sol–gel process is a relatively novel technique for the preparation of nanocrystalline TiO₂. It has been demonstrated that using the sol–gel process, the physicochemical and electrochemical properties of TiO₂ can be modified in order to improve its application [8]. This technique provides a simple and easy means of synthesizing nanoparticles at ambient temperature under atmospheric pressure. Since this process occurs in a solution, it has all the advantages over other preparation techniques regarding the purity, homogeneity, possibility of introducing large concentration of dopants, stoichiometry control, simplicity of processing and composition control. Through the sol–gel process, the growth of TiO₂ colloids in submicrometer range can be

A. Golubović (✉) · M. Šćepanović · S. Aškrabić · V. Berec ·
Z. Dohčević-Mitrović · Z. V. Popović
Institute of Physics, Pregrevica 118, P.O. Box 68,
11080 Zemun, Serbia
e-mail: golubovic@phy.bg.ac.yu

A. Kremenović
Faculty of Mining and Geology, University of Belgrade,
Djušina 7, P.O. Box 162, 11000 Belgrade, Serbia

Finally, the comparison of the obtained values for brookite to anatase ratio ($I_{B(\Sigma)}/I_{A(B1g)}$) with the behaviour of intrinsic linewidth (Γ_0) of $E_{g(1)}$ Raman mode in different samples suggests very interesting conclusion: larger amount of brookite in a sample induces larger values of Γ_0 . This can be a consequence of the structural disorder of anatase due to the presence of brookite phase, but we also must have in mind that the most intensive Raman mode of brookite is at $\sim 150\text{ cm}^{-1}$ [38] and its presence can influence the width of the $E_{g(1)}$ Raman mode at $\sim 143\text{ cm}^{-1}$ (ascribed to anatase).

Although XRD diffraction can give good quantitative results relating to structural and microstructural properties of TiO_2 nanopowders, the collecting of the high resolution XRD patterns and their interpretation as well, are usually time-consuming process. The results presented in this section confirm great potential of Raman spectroscopy in determination of structural properties of TiO_2 nanopowders and the ability of this method to verify a very small variation in these properties as well.

3.5 Correlation between the results

Correlating the parameters of the sol–gel synthesis process with the resulting properties of nanostructured systems is necessary for the systematic control of the material properties. This section describes the influence of the variation of some synthesis parameters on the change in structural properties of obtained anatase nanoparticles, examined by XRD and Raman spectroscopy. Both XRD and Raman spectroscopy could enable more precise determination of the average particle size, compared to AFM measurements. Namely, from the obtained AFM images it wasn't possible to detect subtle variations in the particle size, of the order of few nanometres.

The influence of calcination temperature on anatase nanoparticles size was investigated earlier by several authors [9, 42]. The tendency of particle size to increase with increasing calcination temperature demonstrated in their papers was confirmed by our results shown in Fig. 6. When all other synthesis parameters are fixed higher calcination temperature leads to the formation of larger nanoparticles, although the results presented in Fig. 9 imply that calcination temperature doesn't affect the $I_{B(\Sigma)}/I_{A(B1g)}$ ratio.

The pH value of the hydrothermal solution can influence significantly polymorphous structure of TiO_2 nanopowders. Low and neutral pH values result in production of titania powders containing brookite and sometimes rutile. The alkalic solution with high pH values leads to the formation of anatase powders with high stability during calcination [43]. In our experiments pH values were set to 9.3 and 10.3, what was convenient for obtaining pure anatase

powders, but in both XRD and Raman spectra the small content of amorphous brookite phase was observed. The same results were found in the literature (XRD peak at $2\theta = 30.8$) [44–46], but without any comments about brookite phase. Our results presented in Figs. 6 and 9, confirm the decreasing tendency of brookite content (and increasing particles size) with increasing pH value from 9.3 to 10.3 for relatively low heating rate of calcination process $Tr_1 = 60\text{ }^\circ\text{C/h}$. However, the samples A6 and A7 produced with high heating rate $Tr_2 = 135\text{ }^\circ\text{C/h}$ show anomalous behaviour. They have almost the same ratio of brookite to anatase contents although they were prepared using different pH values of the hydrothermal solution. It seems that alkalic pH value is not high enough to avoid formation of brookite from TiCl_4 precursor although the literature suggests that brookite phase was observed only in acidic solutions [47].

Presented results show that properties of TiO_2 nanopowders depend not only on one parameter of sol–gel synthesis process. The nanoparticles size and content of brookite in produced nanopowders are the result of subtle interplay between many synthesis parameters such as the type of precursor, temperature and heating rate of calcination process and pH value of the hydrothermal solution.

4 Conclusion

A detailed Raman study of anatase TiO_2 nanopowders synthesized by sol–gel method with crystallite size varying between 11 and 15 nm was presented in this paper. It was demonstrated that the frequency shift and broadening of the most intensive anatase $E_{g(1)}$ Raman mode are the consequence of both confinement effect due to the nanosized nature of anatase crystallites and the presence of brookite phase in the samples. This enables not only basic phase identification but also the estimation of the nanoparticle size and brookite content in TiO_2 nanopowders following the subtle changes in the Raman spectra.

This study allows us to investigate the structural variations of nanosized TiO_2 arisen from the change in the sol–gel synthesis conditions. It was shown that nanostructured characteristics of the produced TiO_2 powders are the result of subtle interplay of several synthesis parameters: temperature and heating rate of calcination process and pH value of the hydrothermal solution. Presented results imply that the TiCl_4 as precursor may be responsible for the presence of small amount of disordered brookite phase in all samples despite of the alkalic solution used in the process of hydrolysis.

Acknowledgement Authors express thanks to Mirjana Grujić-Brojčin for the original software solutions which enabled the

application of the PCM for numerical simulation of Raman spectra of investigated samples. Authors are also grateful to Toma Radić and Marko Radović for their help during AFM measurements. This work is supported by the Serbian Ministry of Science under project no. 141047, the OPSA-026283 project within the AC FP6 programme and SASA project F-134.

References

- Venz PA, Klopogge JT, Frost RL (2000) *Langmuir* 16:4962. doi:10.1021/la990830u
- Murugan AV, Samuel V, Ravi V (2006) *Mater Lett* 60:479. doi:10.1016/j.matlet.2005.09.017
- Sakka S (2006) *J Sol-Gel Sci Technol* 37:135. doi:10.1007/s10971-006-6433-z
- Hart JN, Menzies D, Cheng Y-B, Simon GP, Spiccia L (2006) *J Sol-Gel Sci Technol* 40:45. doi:10.1007/s10971-006-8387-6
- Kim I-D, Rothschild A, Yang D-J, Tuller HL (2008) *Sens Actuators B Chem* 130:9. doi:10.1016/j.snb.2007.07.092
- Granqvist CG, Azens A, Isidorsson J, Kharrazi M, Kullman L, Lindström T, Niklasson GA, Ribbing C-G, Rönnow D, Strømme Mattsson M, Veszelei M (1997) *J Non-Cryst Solids* 218:273. doi:10.1016/S0022-3093(97)00145-2
- Zhang J, Wang X, Zheng W-T, Kong X-G, Sun Y-J, Wang X (2007) *Mater Lett* 61:1658. doi:10.1016/j.matlet.2006.07.093
- Venkatachalam N, Palanichamy M, Arabindoo B, Murugesan V (2007) *Mater Chem Phys* 104:454. doi:10.1016/j.matchemphys.2007.04.003
- Gouadec G, Colombari P (2007) *Prog Cryst Growth Char Mater* 53:1
- Zhang WF, He YL, Zhang MS, Yin Z, Chen Q (2000) *J Phys D Appl Phys* 33:912. doi:10.1088/0022-3727/33/8/305
- Du YL, Deng Y, Zhang MS (2006) *J Phys Chem Solids* 67:2405. doi:10.1016/j.jpcs.2006.06.020
- Gao K (2007) *Phys B* 398:33. doi:10.1016/j.physb.2007.04.013
- Zhang J, Li MJ, Feng ZC, Chen J, Li C (2006) *J Phys Chem B* 110:927. doi:10.1021/jp0552473
- Rodríguez-Carvajal J (1998) FullProf computer program. <ftp://charybde.saclay.cea.fr/pub/divers/fullprof.98/windows/winfp98.zip>
- Kremenovic A, Blanus J, Antic B, Colombari P, Kahlenberg V, Jovalekic C, Dukic J (2007) *Nanotechnology* 18:145616
- Lakshmi BB, Dorhout PK, Martin CR (1996) *Chem Mater* 9:857. doi:10.1021/cm9605577
- Zhang W, Chen S, Yu S, Yin Y (2007) *J Cryst Growth* 308:122. doi:10.1016/j.jcrysgro.2007.07.053
- Aruna ST, Tirosh S, Zaban A (2000) *J Mater Chem* 10:2388. doi:10.1039/b001718n
- Sun J, Gao L (2002) *J Am Ceram Soc* 85:2382. doi:10.1111/j.1151-2916.2002.tb00467.x
- Díaz-Díez MÁ, Macías-García A, Silvero G, Gordillo R, Caruso R (2003) *Ceram Int* 29:471. doi:10.1016/S0272-8842(02)00189-X
- Venz PA, Frost RL, Klopogge JT (2000) *J Non-Cryst Solids* 276:95. doi:10.1016/S0022-3093(00)00267-2
- Wang P, Wang D, Xie T, Li H, Yang M, Wei X (2008) *Mater Chem Phys* 109:181. doi:10.1016/j.matchemphys.2007.11.019
- He D, Lin F (2007) *Mater Lett* 61:3385. doi:10.1016/j.matlet.2006.11.075
- Hari-Bala, Guo Y, Zhao X, Zhao J, Fu W, Ding X, Jiang Y, Yu K, Lv X, Wang Z (2006) *Mater Lett* 60:494. doi:10.1016/j.matlet.2005.09.030
- Liu AR, Wang SM, Zhao YR, Zheng Z (2006) *Mater Chem Phys* 99:131. doi:10.1016/j.matchemphys.2005.10.003
- Sugimoto T, Zhou X, Muramatsu A (2003) *J Colloid Interface Sci* 259:43. doi:10.1016/S0021-9797(03)00036-5
- Ohsaka T, Izumi F, Fujiki Y (1978) *J Raman Spectrosc* 7:321. doi:10.1002/jrs.1250070606
- Šćepanović MJ, Grujić-Brojčin MU, Dohčević-Mitrović ZD, Popović ZV (2006) *Mater Sci Forum* 518:101
- Šćepanović MJ, Grujić-Brojčin M, Dohčević-Mitrović Z, Popović ZV (2007) *Appl Phys A* 86:365. doi:10.1007/s00339-006-3775-x
- Li Bassi A, Cattaneo D, Russo V, Bottani CE, Barborini E, Mazza T, Piseri P, Milani P, Emst FO, Wegner K, Pratsinis SE (2005) *J Appl Phys* 98:074305. doi:10.1063/1.2061894
- Kelly S, Pollak FH, Tomkiewicz M (1997) *J Phys Chem B* 101:2730. doi:10.1021/jp962747a
- Bersani D, Lottici PP (1998) *Appl Phys Lett* 72:73. doi:10.1063/1.120648
- Richter H, Wang ZP, Ley L (1981) *Solid State Commun* 39:625. doi:10.1016/0038-1098(81)90337-9
- Campbell IH, Fauchet PM (1984) *Solid State Commun* 58:739. doi:10.1016/0038-1098(86)90513-2
- Spanier JE, Robinson RD, Zhang F, Chan SW, Herman IP (2001) *Phys Rev B* 64:245407. doi:10.1103/PhysRevB.64.245407
- Parker JC, Siegel RW (1990) *Appl Phys Lett* 57:943. doi:10.1063/1.104274
- Zhu KR, Zhang MS, Chen Q, Yin Z (2005) *Phys Lett A* 340:220. doi:10.1016/j.physleta.2005.04.008
- Mikami M, Nakamura S, Kitao O, Arakawa H (2002) *Phys Rev B* 66:155213. doi:10.1103/PhysRevB.66.155213
- Ivanda M, Tonejc AM, Djerdj I, Gotić M, Musić S, Mariotto G, Montagna M (2002) *Nanoscale spectroscopy and its applications in semiconductor research*, Lecture Notes in Physics, vol 588. Springer, Berlin, p 24
- Djaoued Y, Brüning R, Bersani D, Lottici PP, Badilescu S (2004) *Mater Lett* 58:2618. doi:10.1016/j.matlet.2004.03.034
- Yin S, Ihara K, Liu B, Wang Y, Li R, Sato T (2007) *Phys Scr T* 129:268. doi:10.1088/0031-8949/2007/T129/060
- Bersani D, Lottici PP, Lopez T, Ding X-Z (1998) *J Sol-Gel Sci Technol* 13:849. doi:10.1023/A:1008602718987
- Ovenstone J, Yanagisawa K (1999) *Chem Mater* 11:2770. doi:10.1021/cm990172z
- Deshpande SB, Potdar HS, Kholam YB, Patil KR, Pasricha R, Jacob NE (2006) *Mater Chem Phys* 97:207. doi:10.1016/j.matchemphys.2005.02.014
- Khanna PK, Singh N, Charan S (2007) *Mater Lett* 61:4725. doi:10.1016/j.matlet.2007.03.064
- Khan R, Woo Kim S, Kim T-J, Nam C-M (2008) *Mater Chem Phys* 112:167
- Pottier A, Chanéac C, Tronc E, Mazerolles L, Jolivet J-P (2001) *J Mater Chem* 11:116. doi:10.1039/b100435m

Characterization of La-Doped TiO₂ Nanopowders by Raman Spectroscopy

M. ŠĆEPANOVIĆ^{a,*}, S. AŠKRABIĆ^a, V. BEREC^a, A. GOLUBOVIĆ^a, Z. DOHČEVIĆ-MITROVIĆ^a,
A. KREMENOVIĆ^b AND Z.V. POPOVIĆ^a

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

^bFaculty of Mining and Geology, Laboratory for Crystallography
University of Belgrade, Djušina 7, 11000 Belgrade, Serbia

Titanium dioxide (TiO₂) nanopowders doped with 0.65, 1, 2, 3 and 4 wt.% of lanthanum ions (La³⁺) were synthesized by sol-gel technology. Dependence of structural and morphological characteristics of nanopowders on La³⁺ content and synthesis conditions is investigated by the Raman spectroscopy. Very intensive modes observed in the Raman spectra of all nanopowder samples are assigned to anatase phase of TiO₂. Additional Raman modes of extremely low intensity can be related to the presence of certain amount of highly disordered brookite phase in nanopowders. Dependence of the intensity ratio of the Raman modes which originate from anatase and brookite on doping conditions is specially analyzed. In order to estimate the variation of nanocrystallite size with dopant content, shift and asymmetrical broadening of the most intensive E_g Raman mode of anatase are analyzed by phonon confinement model. The obtained results are compared with the results of X-ray diffraction spectroscopy. Special attention is dedicated to the changes in the Raman spectra of pure and La-doped TiO₂ nanopowders observed after high temperature treatment.

PACS numbers: 81.20.Fw, 81.07.Wx, 78.30.-j, 07.05.Tp

1. Introduction

Titanium dioxide has three polymorphs: rutile (tetragonal, $P4_2/mnm$), anatase (tetragonal, $I4_1/amd$), and brookite (orthorhombic, $Pbca$). All of them have numerous applications as important industrial materials. In recent years, nanosized TiO₂, especially anatase TiO₂, has attracted much attention as key material for photocatalysts [1], dye-sensitized solar cells [2], gas sensors [3] and electrochromic devices [4]. The applications of nanosized anatase TiO₂ are primarily determined by its physicochemical properties such as crystalline structure, particle size, surface area, porosity and thermal stability. The aim of this paper is to investigate the variations in structure of anatase nanopowders, synthesized by sol-gel method, induced by doping with lanthanum. Structural properties, such as: existence of mixed phases (anatase in combination with considerable amount of rutile or brookite phase), particle size and particle size distribution, as well as value and type of the strain (compressed or tensile) determined by the Raman spectroscopy are correlated to the content of La-dopant.

2. Experimental details

TiCl₄ was used as the precursor in the synthesis process. The Ti(OH)₄ hydrogel was obtained by hydrolysis of TiCl₄ at 0°C with controlled addition of

2.5 wt.% aqueous ammonia into the aqueous solution of TiCl₄ (0.3 mol/l) and careful control of the pH value of the solution (9.3). TiCl₄ is soluble in water but it experiences rigorous reaction at 20°C which can be very important to perform this reaction at lower temperature. After aging in the mother liquor for 5 h, the as-prepared hydrogel was filtered and washed out with deionized water until complete removal of chlorine ions. The obtained Ti(OH)₄ hydrogel was converted to its ethanol-gel by repeated exchange with anhydrous ethanol for several times (by repeated introduction of anhydrous ethanol). The obtained alcogel represents the starting point for production of TiO₂ nanoparticles. Alcogel was placed in a vessel, dried at 280°C and calcined at temperature of 550°C, after which it was converted to the nanoparticles. In the case of La-doped TiO₂, LaCl₃·7H₂O was used. All chemicals used in this experiment were analytical grades (Merck Chemicals) and were used as received.

Powder X-ray diffraction (XRD) was used for the identification of crystalline phases, quantitative phase analysis and estimation of crystallite size and strain. The XRD patterns were collected on a Philips diffractometer (PW1710) employing Cu $K_{\alpha 1,2}$ radiation. Step scanning was performed with 2θ ranging from 10 to 135°, step size of 0.06° and the fixed counting time of 41 s/step. The XRD patterns were used to refine crystallographic structure and microstructural parameters using the procedure explained elsewhere [5, 6]. The Fullprof computer program was used [5].

* corresponding author; e-mail: maja@phy.bg.ac.yu

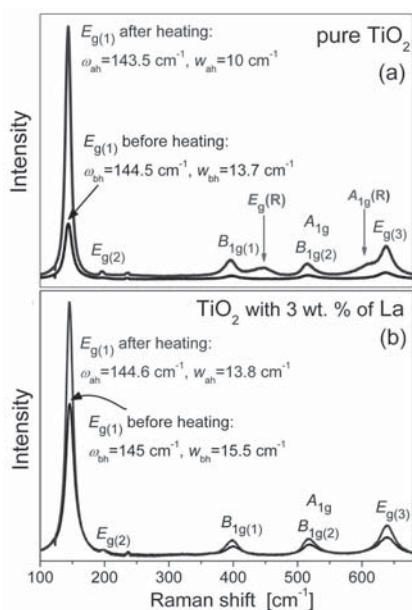


Fig. 5. Raman spectra of pure TiO_2 and TiO_2 doped with 3 wt.% of La at room temperature before and after heating to 800°C . ω is the mode frequency and w is the linewidth of $E_{g(1)}$ Raman mode before (bh) and after (ah) heating. R denotes rutile modes.

plies anatase crystallite growth. Also, the appearance of the new Raman modes assigned to rutile phase was registered. After the same heating treatment of the La-doped sample neither such drastic changes of E_g Raman mode nor the appearance of peaks in the spectrum, belonging to rutile phase, were registered. This allowed us to conclude that La doping stabilized TiO_2 nanostructure at high temperatures and shifted the temperature of anatase–rutile phase transition to values higher than 800°C .

4. Conclusion

A detailed Raman study of sol-gel synthesized anatase TiO_2 nanopowders doped with lanthanum ions (La^{3+}) in the range from 0 to 4 wt.% was presented in this paper. It was demonstrated that the frequency shift and broadening of the most intensive anatase $E_{g(1)}$ Raman mode are the consequences of both confinement effect due to the nanosize dimensions of anatase crystallites and the disorder induced by the presence of brookite phase and La dopant in the samples. This enables not only basic phase identification but also the estimation of the nanoparticles size and brookite contents in TiO_2 nanopowders with different La content.

This study allows us to investigate the structural variations of nanosized TiO_2 arisen from the change in doping conditions and it confirms that doping of TiO_2 by La^{3+} ions significantly improves phase and nanostructure stability of TiO_2 powders at high temperatures.

Acknowledgments

Authors express their thanks to Mirjana Grujić-Brojčin for the original software solutions which enabled application of PCM for numerical simulation of the Raman spectra of the investigated samples. This work is supported by the Serbian Ministry of Science under project No. 141047, the OPISA-026283 project within the AC FP6 programme and SASA project F-134.

References

- [1] S. Sakka, *J. Sol-Gel Sci. Technol.* **37**, 135 (2006).
- [2] J.N. Hart, D. Menzies, Y.-B. Cheng, G.P. Simon, L. Spiccia, *J. Sol-Gel Sci. Technol.* **40**, 45 (2006).
- [3] D. Kim, A. Rothschild, D.-J. Yang, H.L. Tuller, *Sensor Actuat. B-Chem.* **130**, 9 (2008).
- [4] C.G. Granqvist, A. Azens, J. Isidorsson, M. Kharrazi, L. Kullman, T. Lindström, G.A. Niklasson, C.-G. Ribbing, D. Rönnow, M. Strømme Mattsson, M. Veszeli, *J. Non-Cryst. Solids* **218**, 273 (1997).
- [5] J. Rodriguez-Carvajal, 1998, FullProf computer program; <ftp://charybde.saclay cea.fr/pub/divers/fullprof.98/windows/winfp98.zip>.
- [6] A. Kremenović, J. Blanus, B. Antic, Ph. Colomban, V. Kahlenberg, C. Jovalekic, J. Dukic, *Nanotechnology* **18**, 145616 (2007).
- [7] T. Ohsaka, F. Izumi, Y. Fujiki, *J. Raman Spectrosc.* **7**, 321 (1978).
- [8] M.J. Šćepanović, M.U. Grujić-Brojčin, Z.D. Dohčević-Mitrović, Z.V. Popović, *Mater. Sci. Forum* **518**, 101 (2006).
- [9] M.J. Šćepanović, M. Grujić-Brojčin, Z. Dohčević-Mitrović, Z.V. Popović, *Appl. Phys. A* **86**, 365 (2007).
- [10] D. Bersani, P.P. Lottici, *Appl. Phys. Lett.* **72**, 73 (1998).
- [11] H. Richter, Z.P. Wang, L. Ley, *Solid State Commun.* **39**, 625 (1981).
- [12] I.H. Campbell, P.M. Fauchet, *Solid State Commun.* **58**, 739 (1984).
- [13] J.E. Spanier, R.D. Robinson, F. Zhang, S.W. Chan, I.P. Herman, *Phys. Rev. B* **64**, 245407 (2001).
- [14] J.C. Parker, R.W. Siegel, *Appl. Phys. Lett.* **57**, 943 (1990).
- [15] K.R. Zhu, M.S. Zhang, Q. Chen, Z. Yin, *Phys. Lett. A* **340**, 220 (2005).
- [16] G. Gouadec, P. Colomban, *Prog. Cryst. Growth Charact. Mater.* **53**, 56 (2007).
- [17] A. Golubović, M. Šćepanović, A. Kremenović, S. Aškračić, V. Berec, Z. Dohčević-Mitrović, Z.V. Popović, *J. Sol-Gel Sci. Technol.* **49**, 311 (2009).
- [18] Y. Djaoued, R. Brüning, D. Bersani, P.P. Lottici, S. Badilescu, *Mater. Lett.* **58**, 2618 (2004).
- [19] S. Yin, K. Ihara, B. Liu, Y. Wang, R. Li, T. Sato, *Phys. Scr. T* **129**, 268 (2007).

Structural characterization of self-assembled ZnO nanoparticles obtained by the sol–gel method from $\text{Zn}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$

D Luković Golić¹, G Branković¹, M Počuča Nešić¹, K Vojisljević¹,
A Rečnik^{2,3}, N Daneu^{2,3}, S Bernik^{2,3}, M Šćepanović⁴, D Polet⁵ and
Z Branković¹

¹ Institute for Multidisciplinary Research, University of Belgrade, Kneza Višeslava 1a, 11030 Belgrade, Serbia

² Jožef Štefan Institute, Jamova 39, 1000 Ljubljana, Slovenia

³ Center of Excellence NAMASTE, Jamova 39, 1000 Ljubljana, Slovenia

⁴ Center for Solid State Physics and New Materials, Institute of Physics, University of Belgrade, Pregrevica 118, 11080 Belgrade, Serbia

⁵ Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Karnegijeva 4, 11000 Belgrade, Serbia

E-mail: [danijela@imsi.rs](mailto:danjela@imsi.rs) (D Luković Golić) and zorica.brankovic@imsi.rs

Received 9 May 2011, in final form 27 July 2011

Published 5 September 2011

Online at stacks.iop.org/Nano/22/395603

Abstract

Zinc oxide nanopowders were synthesized by the sol–gel method from an ethanol solution of zinc acetate dihydrate. Detailed structural and microstructural investigations were carried out using x-ray diffraction, Raman spectroscopy, thermogravimetric and differential thermal analyses, as well as high-resolution transmission electron microscopy (TEM) and field-emission scanning electron microscopy. The intermediate compound of the reaction was layered zinc hydroxide acetate that further transforms into hexagonally shaped ZnO crystalline nanoplates ($d_m = 4$ nm), which aggregate into larger spherical particles. According to the TEM analysis the ZnO nanoparticles were self-assembled into larger particles with the same orientation, i.e. aligned lattice planes of the particles. A further solvothermal treatment resulted in hexagonal, prismatic ZnO mesocrystals.

 Online supplementary data available from stacks.iop.org/Nano/22/395603/mmedia

1. Introduction

Zinc oxide is a wide-bandgap II–VI semiconductor with a direct band gap of 3.37 eV and a large exciton binding energy of 60 meV. ZnO has numerous important applications, including varistors, light-emitting diodes, UV lasers, transparent conductive oxides, field-emission displays, photocatalysts, solar-energy conversion, gas sensors, pigments in the pharmaceutical and cosmetic industries, and as an industrial additive [1–10]. In the form of nanostructures, ZnO exhibits new properties that are especially interesting for optical and electronic devices [4, 5]. ZnO nanoparticles can be prepared by different methods (solution methods,

chemical vapor deposition, physical vapor deposition, metal–organic vapor phase epitaxy), but the sol–gel method has some advantages, such as simplicity, reproducibility, and the low cost of the chemicals. The crystallite size and the morphology of the ZnO powders strongly depend on the synthesis method. They have a crucial influence on the properties of ZnO powder and, furthermore, determine the scale of applications of this material.

In our work ZnO nanoparticles were prepared by the sol–gel method starting from zinc acetate dihydrate. The structural and chemical properties of ZnO powders prepared from this precursor strongly depend on the temperature and the nature of the catalyst used in the hydrolysis [11]. It is

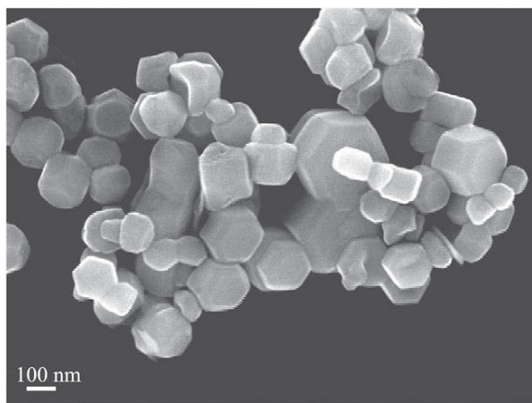


Figure 7. FESEM image of product C containing pure ZnO.

that the obtained particles are uniform in shape (figure 8). The whole particle is in the same crystal orientation. The particles are mostly thicker on the edges and with smaller constituent particles clearly visible on their surface. Difference in size of crystallites, obtained by XRD and TEM, confirmed the internal structure of hexagonal prismatic particles and its mesocrystalline nature, i.e. the existence of smaller constituent

particles and grain boundaries. The SAED pattern confirmed the crystalline nature of the particles. The particles tend to assemble further in chains, preserving the same orientation (as confirmed by the SAED pattern). Some larger particles are hollow in the center. The presence of smaller particles and pores inside the larger hexagonal plates and the single-crystal diffraction pattern suggest the mesocrystalline nature of the particles. There are numerous examples of ZnO mesocrystals in the literature [19, 50]. In these articles it was shown that the presence of organic additives could promote or suppress the growth of ZnO mesocrystals along the (001) direction, which is the normal growth direction of ZnO. For example, similar morphologies to those in our study, i.e. sheet-like ZnO mesocrystals composed of hexagonal nanoplatelets, were obtained owing to the introduction of cetyltrimethylammonium bromide (CTAB) [51]. Zinc hydroxide double salt (abbreviated in [51] as Zn-HDS) nanoparticles appeared as an intermediate, whereas CTAB has a key role in the self-assembly of Zn-HDS nanoparticles to Zn-HDS mesocrystals. The transformation of Zn-HDS to ZnO and the inhibition of the crystal growth along the (001) direction due to the adsorption of the CTAB led to the creation of ZnO mesocrystals. Similar microstructures are reported by some other authors [52–54] but in the presence of different organic surface-protecting molecules which disable the growth in the (001) direction.

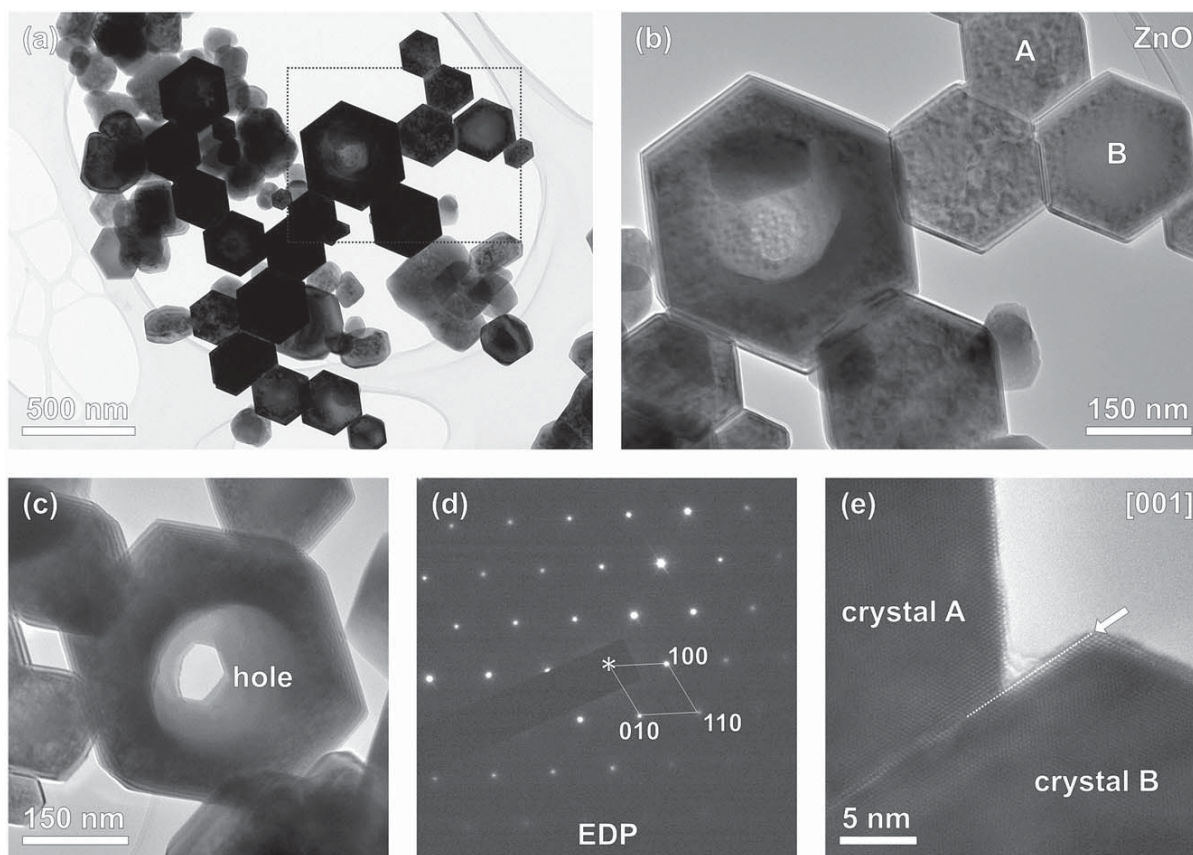


Figure 8. (a) High-resolution transmission electron micrograph (HRTEM) of the product C; (b), (c) magnified HRTEM image of the same powder; (d) corresponding electron diffraction pattern; (e) boundary facet between two adjacent hexagonal mesocrystals, oriented along (001).

Comparative study of CeO₂ nanopowders obtained by the hydrothermal method from various precursors

Jelena Zdravković^a, Bojana Simović^b, Aleksandar Golubović^{c,*}, Dejan Poletić^d, Ivana Veljković^b,
Maja Šćepanović^c, Goran Branković^b

^aInnovation Centre – Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Karnegijeva 4, Belgrade, Serbia

^bInstitute for Multidisciplinary Research, University of Belgrade, Kneza Višeslava 1, 11000 Belgrade, Serbia

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

^dDepartment of General and Inorganic Chemistry, Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Karnegijeva 4, Belgrade, Serbia

Received 23 June 2014; received in revised form 20 August 2014; accepted 28 August 2014

Available online 19 September 2014

Abstract

The effects of common precursors used in the synthesis of CeO₂ nanopowders were investigated, and the structural and spectral properties of the resulting products were compared. Two cerium (III) salts, *i.e.*, Ce(NO₃)₃·6H₂O and CeCl₃·7H₂O, and two cerium (IV) salts, *i.e.*, Ce(SO₄)₂·4H₂O and (NH₄)₂Ce(NO₃)₆ were applied. The proposed procedures for the CeO₂ preparations were realized using the same hydrothermal treatment conditions. The products were characterized using X-ray powder diffraction (XRD) and thermogravimetric (TG) analysis, and the morphology was determined using scanning (SEM) and transmission electron microscopy (TEM). The spectral properties of the obtained nanopowders were characterized by FT-IR, Raman scattering and UV–vis spectroscopy. The results revealed the influence of the precursors on the crystallinity, crystallite size, band gap energy, morphology and purity of the synthesized samples.

© 2014 Elsevier Ltd and Techna Group S.r.l. All rights reserved.

Keywords: A. Powders: chemical preparation; B. Spectroscopy; C. Optical properties; D. CeO₂

1. Introduction

Cerium dioxide or ceria, CeO₂, is currently a subject of great interest due to its wide range of applications, *e.g.*, as a supporting materials for three-way catalysis [1,2], oxygen sensors, solid electrolytes in solid oxide fuel cells that utilize the oxygen storage capacity [3,4], absorbents for fluoride ions or arsenic-based compounds, and as a substance to filter out ultraviolet radiation [5,6]. Materials based on CeO₂ are versatile and have a broad scope of potential application, resulting in the development of various synthetic techniques for its production: the numerous published procedures for the preparation of CeO₂ nanoparticles include room temperature precipitation from solutions [7], sonochemical synthesis [5], microemulsion-based preparation [8], electrode deposition [9], mechanochemical processing [10],

thermal decomposition [11], spray pyrolysis [12], thermal hydrolysis [13], solvo- [14] and hydrothermal synthesis [15], and sol–gel methods [16].

The main issues with ceria-based materials are that these materials are generally synthesized at high pressures, at salt–solvent mediated high temperatures, or with surface capping agents. Hence, the sizes of the prepared ceria particles are relatively large. Nano- and micro-structured CeO₂ are well known to have higher surface-to-volume ratios with respect to the bulk material, which results in better redox, transport [17] and catalytic properties [18]. Optimal properties of CeO₂ generally appear at small grains sizes, smaller than 10 nm. For this reason, developing low-cost methods for obtaining monodisperse particles with a low degree of agglomeration is still desirable. In our study, two cerium (III) and two cerium (IV) salts were used as precursors. The proposed hydrothermal treatment procedure was chosen as the synthesis strategy due to advantages that include low temperatures and easily

*Corresponding author. Tel.: +381 11 3713 047; fax: +381 11 3160 531.

E-mail address: golubovic@ipb.ac.rs (A. Golubović).

by low temperature hydrothermal treatment. Crystallites of similar morphology resembling monoclinic plates were obtained in all cases. Both cerium (III) and cerium (IV) compounds were equally suitable for the preparation of ceria nanoparticles, and the addition of an oxidant such as H_2O_2 was unnecessary. The choice of the precursor yielded relatively different results in terms of crystallinity and crystallite size. With the exception of $\text{CeCl}_3 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ as a precursor, rather uniform crystallite size distributions (10–20 nm) were obtained. Nevertheless, the smallest crystallites (approximately 10 nm) with negligible microstrain were obtained starting from Ce (III) or Ce (IV) salts containing nitrate ions. The application of surfactants, especially polyethylene glycol, was directly related to small crystallite sizes, and for this reason, using surfactants is recommended in future studies.

Nano-sized CeO_2 obtained from $\text{Ce}(\text{SO}_4)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ contained a significant amounts of adsorbed SO_4^{2-} ions, causing the highest degree of particle agglomeration, as well as the presence of defects and microstrain. Thus, the presence of SO_4^{2-} ions in the reaction mixture should be avoided. This observation was contrary to the conclusion of Xu and co-workers [22], who found cerium (IV) sulfate was more suitable for the production of CeO_2 nanoparticles than, for example, cerium (III) nitrate.

Acknowledgments

The authors express their thanks to Mirjana Grujić-Brojčin for the original software solutions, which enabled application of PCM for numerical simulation of the Raman spectra of the investigated samples.

Support of this work by the Ministry of Education, Science and Development of the Republic of Serbia (Grants nos. III45007, III45018 and ON171032) is gratefully acknowledged, as well as the SASA project F-134.

References

- [1] A. Trovarelli, Catalytic properties of ceria and CeO_2 -containing materials, *Catal. Rev. Sci. Eng.* 38 (1996) 439–520.
- [2] J. Kašpar, P. Fornasiero, M. Graziani, Use of CeO_2 -based oxides in the three way catalysis, *Catal. Today* 50 (1999) 285–298.
- [3] P. Jasinski, T. Suzuki, H.U. Anderson, Nanocrystalline undoped ceria oxygen sensor, *Sens. Actuators B* 95 (2003) 73–77.
- [4] B.C.H. Steele, Appraisal of $\text{Ce}_{1-y}\text{Gd}_y\text{O}_{2-y/2}$ electrolytes for IT-SOFC operation at 500 °C, *Solid State Ion.* 129 (2000) 95–110.
- [5] R.J. Qi, Y.J. Zhu, G.F. Cheng, Y.H. Huang, Sonochemical synthesis of single-crystalline CeOHCO_3 rods and their thermal conversion to CeO_2 rods, *Nanotechnology* 16 (2005) 2502–2506.
- [6] N. Imanaka, T. Masui, H. Hirai, G. Adachi, Amorphous cerium-titanium solid solution phosphate as a novel family of band gap tunable sunscreen materials, *Chem. Mater.* 15 (2003) 2289–2291.
- [7] P. Ji, J. Zhang, F. Chen, M. Anpo, Study of adsorption and degradation of acid orange 7 on the surface of CeO_2 under visible light irradiation, *Appl. Catal. B* 85 (2009) 148–154.
- [8] A. Bumajdad, M.I. Zaki, J. Eastoe, L. Pasupulety, Microemulsion-based synthesis of CeO_2 powders with high surface area and high-temperature stabilities, *Langmuir* 20 (2004) 11223–11233.
- [9] I. Yamaguchi, M. Watanabe, T. Shinagawa, M. Chigane, M. Inaba, A. Tasaka, M. Izaki, Preparation of core/shell and hollow nanostructures of cerium oxide by electrodeposition on a polystyrene sphere template, *ACS Appl. Mater. Interfaces* 1 (2009) 1070–1075.
- [10] T. Tsuzuki, J.S. Robinson, P.G. McCormick, UV-shielding ceramic nanoparticles synthesised by mechanochemical processing, *J. Aust. Ceram. Soc.* 38 (2002) 15–19.
- [11] Y. Wang, T. Mori, J.G. Li, T. Ikegami, Low-temperature synthesis of praseodymium-doped ceria nanopowders, *J. Aust. Ceram. Soc.* 85 (2002) 3105–3107.
- [12] C.Y. Chen, C.L. Liu, Doped ceria powders prepared by spray pyrolysis for gas sensing applications, *Ceram. Int.* 37 (2011) 2353–2358.
- [13] M. Hirano, Y. Fukuda, H. Iwata, Y. Hotta, M. Inagaki, Preparation and spherical agglomeration of crystalline cerium(IV) oxide nanoparticles by thermal hydrolysis, *J. Am. Ceram. Soc.* 83 (2000) 1287–1289.
- [14] L. Qian, J. Zhu, W. Du, X. Qian, Solvothermal synthesis, electrochemical and photocatalytic properties of monodispersed CeO_2 nanocubes, *Mater. Chem. Phys.* 115 (2009) 835–840.
- [15] (a) M. Hirano, M. Inagaki, Preparation of monodispersed cerium(IV) oxide particles by thermal hydrolysis: influence of the presence of urea and Gd doping on their morphology and growth, *J. Math. Chem.* 10 (2000) 473–477;
(b) Z. Guo, F. Jian, F. Du, A simple method to controlled synthesis of CeO_2 hollow microspheres, *Scr. Mater.* 61 (2009) 48–51.
- [16] H. Xiao, Z. Ai, L. Zhang, Non-aqueous sol–gel synthesized hierarchical CeO_2 nanocrystal microspheres as novel adsorbents for wastewater treatment, *J. Phys. Chem. C* 113 (2009) 16625–16630.
- [17] C. Sun, H. Li, H. Zhang, Z. Wang, L. Chen, Controlled synthesis of CeO_2 nanorods by a solvothermal method, *Nanotechnology* 16 (2005) 1454–1463.
- [18] D. Zhang, F. Niu, T. Yan, L. Shi, X. Du, J. Fang, Ceria nanospindles: template-free solvothermal synthesis and shape-dependent catalytic activity, *Appl. Surf. Sci.* 257 (2011) 10161–10167.
- [19] G. Wang, Q. Mu, T. Chen, Y. Wang, Synthesis, characterization and photoluminescence of CeO_2 nanoparticles by a facile method at room temperature, *J. Alloys Compd.* 493 (2010) 202–207.
- [20] M.L. Dos Santos, R.C. Lima, C.S. Riccardi, R.L. Tranquilin, P.R. Bueno, J.A. Varela, E. Longo, Preparation and characterization of ceria nanospheres by microwave-hydrothermal method, *Mater. Lett.* 62 (2008) 4509–4511.
- [21] D.E. Zhang, X.M. Ni, H.G. Zheng, X.J. Zhang, J.M. Song, Fabrication of rod-like CeO_2 : characterization, optical and electrochemical properties, *Solid State Sci.* 8 (2006) 1290–1293.
- [22] J. Xu, G. Li, L. Li, CeO_2 nanocrystals: seed-mediated synthesis and size control, *Mater. Res. Bull.* 43 (2008) 990–995.
- [23] G. Zhang, Z. Shen, M. Liu, C. Guo, P. Sun, Z. Yuan, Ba. Li, D. Ding, T. Chen, Synthesis and characterization of mesoporous ceria with hierarchical nanoarchitecture controlled by amino acids, *J. Phys. Chem. B* 110 (2006) 25782–25790.
- [24] H.P. Klug, L.E. Alexander, X-ray Diffraction Procedures, 2nd ed., Wiley, New York, 1974, p. 687.
- [25] G.K. Williamson, W.H. Hall, X-ray line broadening from filed aluminium and wolfram, *Acta Metall.* 1 (1953) 22–31.
- [26] B. Tang, L. Zhuo, J. Ge, G. Wang, Z. Shi, J. Niu, A surfactant-free route to single-crystalline CeO_2 nanowires, *Chem. Commun.* 28 (2005) 3565–3567.
- [27] A. Vantomme, Z.Y. Yuan, G. Du, B.L. Su, Surfactant-assisted large-scale preparation of crystalline CeO_2 nanorods, *Langmuir* 21 (2005) 1132–1135.
- [28] C. Pan, D. Zhang, L. Shi, CTAB assisted hydrothermal synthesis, controlled conversion and CO oxidation properties of CeO_2 nanoplates, nanotubes, and nanorods, *J. Solid State Chem.* 181 (2008) 1298–1306.
- [29] W. Liu, L. Feng, C. Zhang, H. Yang, J. Guo, X. Liu, X. Zhang, Y. Yang, A facile hydrothermal synthesis of 3D flowerlike CeO_2 via a cerium oxalate precursor, *J. Mater. Chem. A* 1 (2013) 6942–6948.
- [30] K. Nakamoto, Infrared and Raman spectra of inorganic and coordination compounds, Part B, 5th ed., Wiley, New York, 1998, p. 70–77.
- [31] A. Tschöpe, D. Schaadt, R. Birringer, J.Y. Ying, Catalytic properties of nanostructured metal oxides synthesized by inert gas condensation, *Nanostruct. Mater.* 9 (1997) 423–432.

ПРИЛОГ 2.3.
(међунар. сарадња)

Subject Invitation to participate in the proposal SciTeCH
From European Commission <EC-NO-REPLY-GRANT-MANAGEMENT@nomail.ec.europa.eu>
To [Grujic-Brojchin] - [MIRA] <myramyra@ipb.ac.rs>
Date 13 Nov 2015 09:09



Europa / Research / Participant Portal notification

Dear Sir/Madam,

The contact person of the following proposal, Mr/Ms Giovanni Ettore GIGANTE, has given you access to his/her draft proposal:

Proposal acronym	: SciTeCH
Draft proposal ID	: SEP-210316752
Call	: H2020-MSCA-ITN-2016
Type of action	: MSCA-ITN-EJD
Topic	: MSCA-ITN-2016
Coordinating organisation	: UNIVERSITA DEGLI STUDI DI ROMA LA SAPIENZA (PIC: 999987745, located in ROMA, IT)
Coordinating contact	: Giovanni Ettore GIGANTE (giovanni.gigante@uniroma1.it - ngigagio)
Your organisation	: INSTITUT ZA FIZIKU (PIC: 999584904)
Your details (as entered by the coordinator)	: Grujic-Brojchin Mira (myramyra@ipb.ac.rs - nmiragru)

This call closes on **2016-01-12 17:00:00** Brussels Local Time. Please contact the person above for any action that you might have to take.

You may access this proposal at any time via the [My Proposals](#) tab in the [Participant Portal](#) using your email myramyra@ipb.ac.rs to authenticate yourself.

Please note that the LEAR (Legal Entity Appointed Representative) of all organisations in this proposal will be notified about their involvement.

With kind regards,
European Commission - Participant Portal Submission System team

This email has been auto-generated. Please do not reply to this account. Your email will not be read. For any inquiries please contact the SEP helpdesk (+32 (2) 29 92222 or DIGIT-EFP7-SEP-SUPPORT@ec.europa.eu)

If you want to change the frequency of receiving notifications with importance "Normal", you can do it in the Participant Portal > [My Notifications](#)

P O T V R D A

o učešću na FP6 projektu OPSA

Kao rukovodilac FP6 projekta OPSA potvrđujem da su sledeći saradnici Centra za fiziku čvrstog stanja i nove materijale bili angažovani na OPSA projektu.

Prof. Dr Zoran V. Popovic, rukovodilac projekta, **10 bodova**

Dr Rados Gajic, rukovodilac. WP2. Fourier transform (FT) spectroscopy in the near-infrared and visible range at low temperatures, **6 bodova**

Dr Zorana Dohcevic-Mitrovic, rukovodilac. WP5. Training courses in optical characterization of nano-sized structures and materials, **6 bodova**

Dr Maja Sćepanović, rukovodilac. WP1. Upgrade of the Raman system with a multichannel detector, confocal microscope with a motorized x,y,z stage and a microscope cryostat, **6 bodova**

Ostali uesnici na projektu, po 4 poena:

Dr Mirjana Grujic – Brojcin

Dr Aleksandar Golubovic

Mr Marko Radovic

Mr Novica Paunovic

MSc Sonja Askrabic

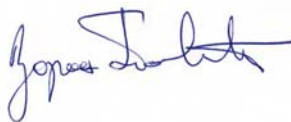
Podaci o projektu:

Project acronym: **OPSA (FP6)**

Project full title: **Centre of Excellence for Optical Spectroscopy Applications in Physics, Material Science and Environmental Protection**

Contract no.: **026283 - OPSA**

Rukovodilac OPSA projekta



Dr Zoran V. Popović

P O T V R D A

U svojstvu rukovodioca projekta **Nano-ET**, koji je pozitivno ocenjen (vidi prilog), a za koji jos nije donesena odluka o finansiranju, izjavljujem da su na istom bili predvidjeni da budu angazovani sledeci saradnici

Prof. Dr Zoran V. Popovic, rukovodilac projekta, **6 bodova**

Dr. Zorana Dohčević-Mitrović, rukovodilac

WP2: Upgrading of research capacities (4 boda) i

WP5: Workshops and conference organization (4 boda)

Dr Igor Stankovic, rukovodilac (4 boda)

WP3: Mobility

Dr Darko Tanskovic, rukovodilac (4 boda)

WP4: Recruitment of researchers

Ucesnici na projektu, po 2 boda

Dr Mirjana Grujić-Brojčin,

Dr. Aleksandar Golubović,

Dr Radmila Kostić,

Dr. Maja Šćepanović,

Kao i doktoranti:

Nenad Lazarevic

Novica Paunovic

Marko Radovic

Sonja Askrabic

Podaci o projektu:

Proposal full title: Research potential reinforcement in the processing of **Nano**-structured Oxide-Based Materials for **Environmental Technologies**

Proposal acronym: **NANO-ET**

Type of funding scheme: **Coordination and support actions (Support)**

Work program topics addressed: **FP7-REGPOT-2010-1**

Rukovodilac projekta



Dr Zoran V. Popovic

Evaluation Summary Report

Call : FP7-REGPOT-2010-1

Funding scheme :

Proposal number : 264052

Proposal acronym : NANO-ET

Proposal title : Research potential reinforcement in the processing of Nano-structured Oxide-Based Materials for Environmental Technologies

Duration (month) : 36

N.	Proposer name	Country	Type	Total cost (€)	%	Grant requested (€)	%
1	INSTITUT ZA FIZIKU	RS		4,671,243.00	100.00	3,054,345.00	100.00
Total :				4,671,243.00	100.00	3,054,345.00	100.00

Abstract :

The NANO-ET project seeks to reinforce the Centre of Excellence for Nanoscience and nanotechnology at the Institute of Physics Belgrade (CEN-IPB), strengthening its innovative approach for development of new environmental technologies for air and water anti-pollution treatment based on nano-structured materials. The reinforcement will be realized through establishment of strategic partnerships with complementary European R&D centres, recruitment of experienced researchers, upgrade of S&T equipment, and enhancement of CEN-IPB visibility. Through the NANO-ET project, CEN-IPB will reach its full potential for research and technological innovation and emerge as an internationally competitive centre of excellence fully integrated in ERA, and a provider of environmental technology expertise at national and regional levels.

ESR- Evaluation Summary Report Co-ordination and support action (Supporting)

IMPORTANT

We believe this proposal is relevant ("in scope") because it addresses, fully or partially, a topic that is open in the call. It conforms to any special conditions set out for this topic in the relevant work programme, and it corresponds to an eligible funding scheme:
IF YES. Please complete the IER, entering your scores and comments for all criteria
IF NO. Please enter your reasons below and notify the Commission.

Yes

SCORING

Scores must be in the range 0-5. Half marks may be given.

Interpretation of the scores:

0- The proposal fails to address the criterion under examination or cannot be judged due to missing or incomplete information.

1- Poor. The criterion is addressed in an inadequate manner, or there are serious inherent weaknesses.

2- Fair. While the proposal broadly addresses the criterion, there are significant weaknesses.

3- Good. The proposal addresses the criterion well, although improvements would be necessary.

4- Very good. The proposal addresses the criterion very well, although certain improvements are still possible.

5- Excellent. The proposal successfully addresses all relevant aspects of the criterion in question. Any shortcomings are minor.

1. Scientific and/or technological excellence (relevant to the topics addressed by the call) (Threshold 3.00/5.00)

Mark: 4.00

Weight: 1.00

The NANO-ET proposal concept is clearly stated and is relevant for this call. The proposal's work plan is composed of 6 WPs that are all well defined and detailed. The SWOT analysis has been carried out and is outlined in the proposal. However little if any convincing justification is given as to how the different results have been arrived at in the SWOT analysis especially those concerning inadequate high performance computing resources; It is not clear what benchmark was used in the SWOT analysis to assess the current state of equipment.

Note: when a proposal only partially addresses the topics, this condition will be reflected in the scoring of this criterion.

- Soundness of concept, and quality of objectives
- Quality and effectiveness of the support action mechanisms, and associated work plan

2. Quality and efficiency of the implementation and the management (1) (Threshold 3.00/5.00)

Mark: 3.00

Evaluation Summary Report

Call : FP7-REGPOT-2010-1
Funding scheme :
Proposal number : 264052
Proposal acronym : NANO-ET
Proposal title : Research potential reinforcement in the processing of Nano-structured Oxide-Based Materials for Environmental Technologies
Duration (month) : 36

The proposed management structure of NANO-ET builds upon established best practices and is appropriate to a project of its scale. Some risk management and contingency plans are also outlined. However, other procedures such as those concerning decision making and the selection of research staff are not provided, this making the transparency of these activities difficult to judge.

Weight: 1.00

The quality and experience of the individual participants with respect to the research field is of high quality, as it is shown by their h-factor.

The coordinating entity has experience in the management of EU funded projects.

The budget is justified. However, the break down of the budget includes expenses that are not eligible or not convincing:
•The cost of funding consumables of the EC host institutions for the training of researchers are high and not justified and it is not eligible under REGPOT program.
•The cost of patent protection (WP6) is not eligible .
•Secondments of two month duration are not clearly justified; information is missing concerning names of host institutions, level of researcher to be seconded and type of activity to be performed at the host institutions.

Due to the above comments, the resources to be committed to the proposal are not fully justified. Without further detailed explanations the budget seems overestimated.

- Appropriateness of the management structure and procedures
- Quality and relevant experience of the individual participants
- Appropriateness of the allocation and justification of the resources to be committed (budget, staff, equipment)

(1) For the purposes of any subsequent negotiation, an above-threshold score for this criterion is regarded as an indication that the consortium has the operational capacity to carry out the work.

3. Potential impact through the development, dissemination and use of project results

(Threshold 3.00/5.00)

Mark: 4.50

At the local level, the proposal would have an impact on the formulation of environmental policies and also boost confidence in eco-technologies. NANO-ET will also contribute to Serbia's National Supercomputing Initiative through R&D effort in high performance computing on the fields of complex systems and nanotechnology.

Weight: 1.00

The upgrading of the research equipment infrastructure, the recruitment of experienced researchers and the training of staff/researchers involved in the proposal will strengthen CEN-IPB's excellence making it more credible at the European level.

Consequently, these impacts would themselves help in the reintegration of experts, although the actual effectiveness of this taking place is debatable.

To achieve the goal of Nano-ET proposal an exhaustive number of dissemination mechanisms are planned. However, some dissemination activities and items are not justified (e.g. logo, calendars, book and patents) for a support action.

- Contribution, at the European and/or international level, to the expected impacts listed in the work programme under the relevant topic/activity
- Note: Refer to the applicable list of impacts specified in the work programme.
- Appropriateness of measures for spreading excellence, exploiting results, and disseminating knowledge, through engagement with stakeholders, and the public at large.

TOTAL

(Threshold 10.00/15.00)

Total: 11.50

Evaluation Summary Report

Call : FP7-REGPOT-2010-1
Funding scheme :
Proposal number : 264052
Proposal acronym : NANO-ET
Proposal title : Research potential reinforcement in the processing of
Nano-structured Oxide-Based Materials for Environmental Technologies
Duration (month) : 36

Any other remarks
e.g. recommendations for negotiation, only if the proposal is above threshold

Does this proposal raise ethical issues?
(If so please complete an ethical issues report form (EIR))

No

CONFIRMATION
of the participation on SCOPES project

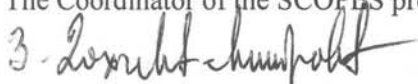
This letter is to certify that the scientists from the Institute of Physics, Belgrade, Serbia, listed below, are participating with their activities in the project N° IZ73Z0_1 28169 under the SCOPES programme (Scientific co-operation between Eastern Europe and Switzerland), titled "Nano-crystalline porous anatase TiO₂ for environmental applications: Synthesis process and transport characteristics", which has started in December 2009.

Dr Zorana Dohčević-Mitrović is the coordinator of the Serbian part of the project, and the participants are:

Prof. Dr Zoran V. Popović
Dr Aleksandar Golubović
Dr Maja Šćepanović
Dr Mirjana Grujić Brojčin
MSc Sonja Aškrabić

Belgrade, 8th July 2010

The Coordinator of the SCOPES project, Serbian partner



Dr Zorana Dohčević-Mitrović
e-mail: zordoh@ipb.ac.rs



СРПСКА АКАДЕМИЈА НАУКА
И УМЕТНОСТИ

ПОТПРЕДСЕДНИК

др. 27/19

29. јун 2010.

Институт за физику
Центар за физику чврстог стања и нове материјале
Дописни члан Зоран Поповић
Др Маја Шћепановић
Прегревица 118
11080 Земун

Предмет: Сарадња са Бугарском академијом наука

У оквиру Споразума о научној сарадњи Српске академије наука и уметности и Бугарске академије наука, у периоду од 2007-2009. остваривана је сарадња на заједничком пројекту **Наноструктурни танкослојни полупроводници погодни за сензорске и меморијске апликације.**

Носиоци пројекта са наше стране били су Институт за физику, Центар за физику чврстог стања и нове материјале (руководиоци: доп. члан Зоран Поповић и др Маја Шћепановић), а са бугарске стране Институт за физику чврстог стања БАН (руководилац: проф. др Диана Нешева-Славова).

Сарадници на пројекту били су: проф. др Зорана Дохчевић-Митровић, мр Мирјана Грујић-Бројчин и Александра Милутиновић.

У периоду 2010-2012. сарадња ће се одвијати на пројекту **Оптичка и фотоелектрична карактеризација танких филмова и наноструктурних слојева на бази ZnSe.**

Руководиоци пројекта са наше стране су доп. члан Зоран Поповић и др Маја Шћепановић, а сарадници су: др Зорана Дохчевић-Митровић и др Мирјана Грујић-Бројчин.



Потпредседник

академик Љубиша Ракић

ПРИЛОГ 2.4.
(орг. одбори)

The Serbian Ceramic Society
Vinča Institute of Nuclear Sciences, University of Belgrade
Institute for Multidisciplinary Research, University of Belgrade
Institute of Physics, University of Belgrade

PROGRAM AND THE BOOK OF ABSTRACTS

1st Conference of the Serbian Ceramic Society
March 17-18. 2011.
Belgrade, Serbia
1CSCS-2011

Edited by:
Snežana Bošković
Zorica Branković
Jasmina Grbović Novaković

ORGANIZING BOARD

Biljana Babić

Vinča Institute of Nuclear Sciences, University of Belgrade

Željka Cvejić

Faculty of Technology, University of Novi Sad

Mirjana Grujić-Brojčin

Institute of Physics, University of Belgrade

Sandra Kurko

Vinča Institute of Nuclear Sciences, University of Belgrade

Milica Počuča-Nešić

Institute for Multidisciplinary Research, University of Belgrade

Željka Rašković

Vinča Institute of Nuclear Sciences, University of Belgrade

Maja Šćepanović

Institute of Physics, University of Belgrade

Mirjana Vijatović

Institute for Multidisciplinary Research, University of Belgrade

Milan Žunić

Institute for Multidisciplinary Research, University of Belgrade

1. Synthesis and Processing

Chairman: S. Bostanjic, Z. Popovic, B. Stokich

10th < 11th Invited lectureAleksandra Nefedova, Boris Drazek, Thomas Walther,
Takashi Yamazaki, Masahiko Komatsu, and Werner
MaderSTRUCTURE AND CHEMISTRY OF BASAL-PLANE
INVERSION BOUNDARIES IN Sb, Fe-DOPED ZnO

Jozef Stefan Institute, Ljubljana, Slovenia

Angew. Chemie, Univ. Bonn, Bonn, Germany

Dep. of Physics, Tokyo University of Science, Tokyo, Japan
USA Incorporated, Boston, Massachusetts, USA

The Serbian Ceramic Society
The Academy of Engineering Sciences of Serbia
Institute for Multidisciplinary Research - University of Belgrade
Institute of Physics - University of Belgrade
Vinča Institute of Nuclear Sciences - University of Belgrade

PROGRAMME and the BOOK of ABSTRACTS

2CSCS-2013

2nd Conference of the Serbian Ceramic Society
June 5-7.2013. Belgrade Serbia

Edited by:
Snežana Bošković
Vladimir V. Srdić
Zorica Branković

Advisory Committee

1. Prof. Slavko Bernik, *Institute "Jožef Štefan", Ljubljana, Slovenia*
2. Prof. Lidija Curković, *University of Zagreb, Croatia*
3. Dr. Viktor Fruit, *Institute of Physical Chemistry „Ilie Murgulescu”, Romanian Academy, Romania*
4. Prof. Vladimir Krstić, *Queens University, Kingston, Canada*
5. Prof. Ravi Kumar, *Indian Institute of Technology – Madras, Chennai, India*
6. Prof. Cristina Leonelli, *Faculty of Engineering, University of Modena and Reggio Emilia, Italy*
7. Prof. Miladin Radović, *Texas A&M University, TX, USA*
8. Prof. Sandro Santucci, *University of L'Aquila, L'Aquila, Italy*
9. Prof. Yano Toyohiko, *Tokyo Institute of Technology, Japan*
10. Prof. Eniko Volceanov, *University Politehnica of Bucharest, Romania*
11. Dr. Vladimir Urbanovich, *Centre of Science and Practice of Materials, Belarus Academy of Sciences, Minsk, Belarus*
12. Prof. Katsumi Yoshida, *Tokyo Institute of Technology, Japan*

Organizing Committee

1. Dr. Dušan Bučevac, *Institute of Nuclear Sciences "Vinča", Belgrade, Serbia*
2. Dr. Mirjana Cocić, *Technical Faculty, Bor, Serbia*
3. Dr. Mirjana Grujić-Brojčin, *Institute of Physics, Zemun, Serbia*
4. Prof. Radmila Jančić-Heinemann, *Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Serbia*
5. Dr. Marija Milanović, *Faculty of Technology, University of Novi Sad, Serbia*
6. Dr. Zorica Marinković-Stanojević, *Institute for Multidisciplinary Research, Belgrade, Serbia*
7. Dr. Sanja Martinović, *ITNMS Belgrade, Serbia*
8. Dr. Snežana Nenadović, *Institute of Nuclear Sciences "Vinča", Belgrade, Serbia*
9. Dr. Marijan Randjelović, *Faculty of Sciences and Mathematics, University of Niš, Serbia*
10. Dr. Ivan Stjepović, *Faculty of Technology, University of Novi Sad, Serbia*
11. Dr. Mirjana Vijatović-Petrović, *Institute for Multidisciplinary Research, Belgrade, Serbia*
12. Dr. Milica Vlahović, *ITNMS Belgrade, Serbia*

Dear ceramists,

On behalf of (2CSCS-2013) and Engineering Sciences Belgrade, Institute University of Belgrade, June 5-7th 2013.

The Serbian Ceramic Society is a community of engineers working in the field of ceramic materials, rather large ceramic industry, traditional and advanced materials, and they are professionally active in energy conversion, composites. The society is organizing an interesting lecture series in Novi Sad under the patronage of the Ministry of Education. In addition, the Serbian Ceramic Society is organizing the Application of Ceramics in the Future.

The aim of the conference is to present the latest research in ceramic materials, their characterization and future scientific cooperation.

The abstracts of the papers presented at the Serbian Ceramic Society Conference will be published in the book which the papers have been accepted for presentation.

1. **Ceramic** hydrothermal wet processing products
2. **High Temperature** microstructure
3. **Electroceramics** multilayered ceramics
4. **Ceramic** tiles, fibres
5. **Refractories** emission
6. **Ceramic**

Four poster presentations will be presented, as mentioned, and will be published in the book Ceramics.

June 5-7th 2013
Belgrade

The Serbian Society for Ceramic Materials
The Academy of Engineering Sciences of Serbia
Institute for Multidisciplinary Research - University of Belgrade
Institute of Physics - University of Belgrade
Vinča Institute of Nuclear Sciences - University of Belgrade



PROGRAMME and the BOOK of ABSTRACTS

3CSCS-2015

3rd Conference of
the Serbian Society for Ceramic Materials
June 15-17.2015. Belgrade Serbia

Edited by:
Branko Matović
Zorica Branković
Dušan Bućevac
Vladimir V. Srdić

16. Prof. Dr. Tatjana Volkov-Husović, *Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Serbia*
17. Dr. Miroslav Komljenović, *Institute for Multidisciplinary Research-University of Belgrade, Serbia*
18. Dr. Maja Sćepanović, *Institute of Physics, University of Belgrade, Serbia*
19. Dr. Tatjana Srećković, *Institute for Multidisciplinary Research - University of Belgrade, Serbia*
20. Dr. Dejan Zagorac, *INN Vinca, University of Belgrade, Serbia*

Organizing Committee

1. Dr. Bratislav Todorović, *Faculty of Technology, Leskovac, Serbia*
2. Dr. Mirjana Cocić, *Technical Faculty, Bor, Serbia*
3. Dr. Mirjana Grujić-Brojčin, *Institute of Physics, Zemun, Serbia*
4. Prof. Radmila Jančić-Heinemann, *Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Serbia*
5. Dr. Marija Milanović, *Faculty of Technology, University of Novi Sad, Serbia*
6. Dr. Zorica Marinković-Stanojević, *Institute for Multidisciplinary Research, Belgrade, Serbia*
7. Dr. Sanja Martinović, *IHTM Belgrade, Serbia*
8. Dr. Marija Prekajski, *Institute of Nuclear Sciences "Vinča", Belgrade, Serbia*
9. Dr. Marijan Randjelović, *PMF, University of Niš, Serbia*
10. Dr. Ivan Stjepović, *Faculty of Technology, University of Novi Sad, Serbia*
11. Dr. Mirjana Vijatović-Petrović, *Institute for Multidisciplinary Research, Belgrade, Serbia*
12. Dr. Milica Vlahović, *IHTM Belgrade, Serbia*
13. Dr. Jelena Purenovic, *Faculty of Technical Science, Cacak, Serbia*
14. Dr. Aleksandar Savić, *Institute for Multidisciplinary Research, Belgrade, Serbia*

ПРИЛОГ 3.1.
(руковођење)



INSTITUT ZA FIZIKU

Centar za fiziku čvrstog stanja i nove materijale


P.O.Box 68
Pregrevica 118, Zemun
11080 Beograd

tel: (+381 11) 3713 190
fax: (+381 11) 3160531
<http://www.ipb.ac.rs/~solid/mainframe.htm>

Београд, 9. децембар 2015. године

ПОТВРДА О РУКОВОЂЕЊУ ПРОЈЕКТНИМ ЗАДАЦИМА

Овим потврђујем да виши научни сарадник др Мирјана Грујић-Бројчин, за коју се покреће избор у звање научни саветник, у оквиру Центра за физику чврстог стања и нове материјале, односно у оквиру пројекта III45018 "Наноструктурни мултифункционални материјали и нанокомпозити" руководила пројектним задацима везаним за фазу "Теоријски прорачуни и нумеричке симулације" на потпројекту "Нанооксидни материјали за примене у технологијама заштите животне средине".



Академик Зоран В. Поповић
Руководилац пројекта III45018



Република Србија

Министарство за науку и технолошки развој

Конкурс за предлагање пројеката у оквиру Програма основних истраживања
за период 2011 – 2014.

<i>ПРОГРАМ</i>	<i>ОСНОВНА ИСТРАЖИВАЊА</i>
----------------	----------------------------

<i>ОБЛАСТ</i>	<i>Физика</i>
---------------	---------------

<i>Назив пројекта</i>	<i>Физика наноструктурних оксидних материјала и јако корелисаних система</i>
---------------------------	--

<i>Евиденциони број</i>	<i>171032</i>
-------------------------	---------------

Rongwei Hu, Č. Petrović Evidence for electron-phonon interaction in Fe1-xMxSb2 (M=Co and Cr; 0 <= x <= 0.5) single crystals Physical Review B 81 (2010) 144302, (1-4).
Страна 3 - Значај истраживања
<p>Значај истраживања Локалне електрон-електрон корелације имају јак утицај на спин, населетрисање и енергију транспорта у различитим стањима материјала. Такви материјали имају велики научни и технолошки значај, а примарни интерес је усмерен ка њиховим транспортним својствима. Нови материјали за термоелектричне примене и примене за направе у спинтронички су специфичан циљ ове области. Термоелектричне направе су реверзибилни топлотни мотори где услед промене ентропије електрона долази до конверзије електричне енергије (некада чак магнетне или еластичне енергије) у топлоту и обрнуто. Док већина савремених направа користи полупроводничке материјале и може да функционисхе ефикасно само на високим температурама, јако корелисане материјали могу да раде и на врло ниским температурама. Разлог је у томе што је прелаз у корелисано основно стање често праћен огромним термоелектричним ефектом, као што је то случај код једињења FeSb2. У сваком случају, ефикасна направа би требало не само да има велику електричну проводност и термоелектрични ефекат (Зебеков коефицијент), него и ниску топлотну проводност, што се тешко постиже у хомогеним узорцима. Зато је велика пажња усмерена ка хетероструктурама, фононским стаклима и другим системима, који могу имати добре термоелектричне перформансе, што је неопходно за успешну примену. Занимљиви термоелектрични ефекти такође су регистровани код корелисаних система изложених спољашњем магнетском пољу. Спинтроника је област у развоју, која се налази на самој граници магнетизма и електронике. Најсавременије направе у спинтронички засноване су на магнетским тунелским спојевима и хетероструктурама са гигантском магнетоотпорношћу. У овим системима и у новим направама за спинтроничку који се заснивају на магнетним полупроводницима, од основног значаја је одзив спина и населетрисања на промене спољашњег магнетског поља и температуре. Ови системи нису још увек довољно разјашњени и многа тешка питања постављају се са металуршке, експерименталне и теоријске тачке гледишта. Да би се стекла знања и постигла контрола над степенима слободе који су релевантни за спин, неопходно је познавање транспорта населетрисања и енергије у корелисаним системима. Свим овим питањима се бавимо у оквиру предложеног пројекта. Допирањем оксидних наноматеријала прелазањим металима намеравамо да се позиционирамо на чело текућих истраживања материјала, који би могли да се примене у следећој генерацији уређаја у спинтронички. Одговарајућим допирањем TiO2, CeO2, ZnO наноматеријала са прелазним металима намеравамо да будемо на челу текућих истраживања о материјалима који ће се користити за следећу генерацију спинтроничких направа. Ови немагнетни полупроводници или изолатори испољавају феромагнетизам на собној и вишим температурама када се допирају катјонима (само неколико процената) прелазних метала као што су: V, Cr, Mn, Fe, Co или Ni. До сада постоји довољно доказа да учени феромагнетизам не потиче од артефаката, нечистоћа или других фаза већ да је суштинско својство ових материјала. Феромагнетно уређење у оксидним наноматеријалима је још увек контроверзно и заслужује даље испитивање. TiO2, CeO2, ZnO наноматеријали као и њихови композити, припадају наноструктурним мултифункционалним материјалима, који имају велики потенцијал у фотокаталитичком разлагању загађивача и представљају атрактивне материјале за стратешке области заштите животне средине, као што су деконтаминација и дезинфекција воде или у нано/био сензорским уређајима. Оптимизација параметара синтезе применом софистицираних нумеричких симулација и комплетнија експериментална карактеризација различитих својстава материјала техникама као што су: оптичка спектроскопија (инфрацрвена, Раманова и фотолуминесцентна спектроскопија, елипсометрија)) и наноспектроскопије (АФМ; STM; SNOM), магнетооптичка и галваноманетна мерења, укључујући и куповину нове опреме (рендгенски дифрактометар, порозиметар), омогућиће дубљин увид у својства ових материјала и довести до развоја наноструктурних катализатора са унапређеним својствима. Оваква истраживања померају границе знања у области заштите вода и ваздуха од загађења и воде ка развоју новог концепта заштите животне средине.</p>
Страна 4 - Општи подаци о реализаторима истраживања
Општи подаци о реализаторима истраживања (Табела 1) (садржај табеле дат на крају)
Страна 5 - Предложени истраживачи
Предложени истраживачи (Табела 2) (садржај табеле дат на крају)
Табела истраживача са бројем болова на основу постигнутих резултата (Табела 3) (садржај табеле дат на крају)
Табела истраживача са бројем болова на основу постигнутих резултата (Табела 4) (садржај табеле дат на крају)
Страна 6 - План истраживања по истраживачким годинама
<p>Опис пројекта ПОТПРОЈЕКАТ 1: Физика јако корелисаних електронских система(руководилац Проф. Др Зоран В. Поповић) ТЕМА 1. Суперпроводност у материјалима базираним на гвожђу Активност 1. Мерења Рамановог расејања у Микро Раман геометрији на узорцима FeTe (Se) при различитим температурама; Активност 2. Наградња Раман експеримента за мерења у макро Раман геометрији при ниским температурама; Активност 3. Мерења Раман спектра узорака FeTe (Se) у макро Раман геометрији; Активност 4. Евалуација добијених резултата; Активност 5. Писање чланка за објављивање о својствима фонона у FeTe (Se) и њиховој улози у суперпроводном механизму. ТЕМА 2. Материјали за термоелектричне примене Активност 1. Мерења микро Раман спектра на различитим температурама монокристалиних узорака FeSb2 допираних Co и Cr; Активност 2. Наградња експеримента за Брилуинову спектроскопију за нискотемпературска мерења; Активност 3. Мерења Брилуинових спектра на монокристалиним узорцима FeSb2; Активност 4. Евалуација добијених резултата; Активност 5. Писање чланка о својствима и улози фонона у колосалном термоелектричном ефекту код FeSb2. ТЕМА3. Физика система са уређењем населетрисања, спинова или орбитала Активност 1. Нискотемпературска мерења микро и макро Раман расејања на поликристалним узорцима MgV2O5 и CaV2O5; Активност 2. Развој двомагнетноског модела за дводимензионни (2D) и тродимензионни (3D) распоред спинова код ових материјала; Активност 3. Евалуација добијених експерименталних и теоријских резултата; Активност 4. Писање чланка о фононским и магнетним својствима Mg(Ca)V2O5. ТЕМА 4. Charge density wave системи Активност 1. Микро и макро Раман мерења на RTe3 (R=ретке земље као Ce, Ho, Er итд) у различитом температурском опсегу; Активност 2. Евалуација добијених експерименталних и теоријских резултата. Активност 3. Писање чланка о улози електронске корелације на формирање charge density of waves стања и његов утицај на фононска својства RTe3 ПОТПРОЈЕКАТ 2. Физика наанооксидних магнетних материјала (руководилац потпројекта Др Мирјана Грујић- Бројичић) ТЕМА 1. Синтеза недопираних TiO2, CeO2 и ZnO нанопрахова сол-гел и сам-прапагирајућом методом на собној температури. Активност 1 варирање основних параметара синтезе; Активност 2 варирање поларних прекурсора из којих се синтетишу нанопрахови. ТЕМА 2. Карактеризација добијених наанооксидних материјала Активност 1. Уградња, тестирање и обука на рендгену Активност 2. Мерења рентгенском дифракцијом; Активност 3. Мерења оптичким методама (инфрацрвена и Раман спектроскопија, елипсометрија. ТЕМА 3. Испитивање порозности и морфологије оксидних наноматеријала Активност 1 Уградња, тестирање и</p>

ПРИЛОГ 4.1.
(цитираност)



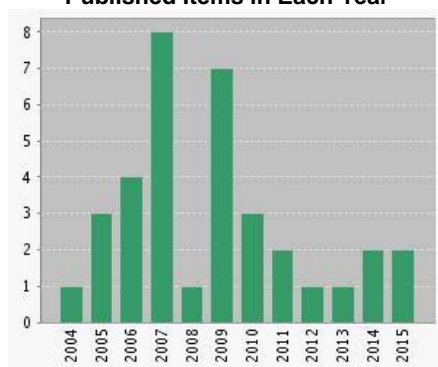
Citation Report: 35

(from All Databases)

You searched for: **AUTHOR:** (grujic-brojin m*)**Timespan:** All years.[...Less](#)

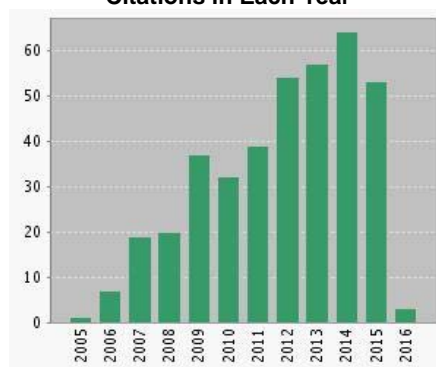
This report reflects citations to source items indexed within All Databases.

Published Items in Each Year



The latest 20 years are displayed.

Citations in Each Year



The latest 20 years are displayed.

Results found: 35

Sum of the Times Cited [?] : 386

Sum of Times Cited without self-citations [?] : 334

Citing Articles [?] : 321

Citing Articles without self-citations [?] : 299

Average Citations per Item [?] : 11.03

h-index [?] : 10

Sort by: Times Cited -- highest to lowest

Page 1 of 4

Use the checkboxes to remove individual items from this Citation Report

or restrict to items published between 1980 and 2016 Go

		2012	2013	2014	2015	2016	Total	Average Citations per Year
		◀				▶		
		54	57	64	53	3	386	35.09
<input type="checkbox"/>	1. The size and strain effects on the Raman spectra of Ce1-xNdxO2-delta (0 <= x <= 0.25) nanopowders							
	By: Dohcevic-Mitrovic, ZD; Scepanovic, MJ; Grujic-Brojin, MU; et al. SOLID STATE COMMUNICATIONS Volume: 137 Issue: 7 Pages: 387-390 Published: FEB 2006	8	10	10	5	0	63	6.30
<input type="checkbox"/>	2. Raman study of structural disorder in ZnO nanopowders							
	By: Scepanovic, M.; Grujic-Brojin, M.; Vojisavljevic, K.; et al. JOURNAL OF RAMAN SPECTROSCOPY Volume: 41 Issue: 9 Pages: 914-921 Published: SEP 2010	13	10	16	11	0	62	10.33
<input type="checkbox"/>	3. Ce1-xY(Nd)(x)O2-delta nanopowders: potential materials for intermediate temperature solid oxide fuel cells							
	By: Dohcevic-Mitrovic, Z. D.; Grujic-Brojin, M.; Scepanovic, M.; et al. Conference: International School and Workshop on Nanoscience and Nanotechnology Location: Monte Porzio Catone, ITALY Date: NOV 14-16, 2005 JOURNAL OF PHYSICS-CONDENSED MATTER Volume: 18 Issue: 33 Special Issue: SI Pages: S2061-S2068 Published: AUG 23 2006	3	3	6	4	0	31	3.10
<input type="checkbox"/>	4. Infrared study of laser synthesized anatase TiO2 nanopowders							
	By: Grujic-Brojin, M; Scepanovic, MJ; Dohcevic-Mitrovic, ZD; et al.	5	0	2	2	0	25	2.27

JOURNAL OF PHYSICS D-APPLIED PHYSICS Volume: 38 Issue: 9 Pages:
1415-1420 Published: MAY 7 2005

5. **Effects of confinement, strain and nonstoichiometry on Raman spectra of anatase TiO₂ nanopowders**
By: Scepanovic, M. J.; Grujic-Brojcin, M. U.; Dohcevic-Mitrovic, Z. D.; et al.
Edited by: Uskokovic, DP; Milonjic, SK; Rakovic, DI
Conference: 7th Conference of the Yugoslav-Materials-Research-Society (Yu-MRS) Location: Herceg Novi, SERBIA MONTENEG Date: SEP 12-16, 2005
Sponsor(s): Yugoslav Mat Res Soc
RECENT DEVELOPMENTS IN ADVANCED MATERIALS AND PROCESSES Book Series: Materials Science Forum Volume: 518 Pages: 101-106 Published: 2006
6. **Temperature dependence of the lowest frequency E-g Raman mode in laser-synthesized anatase TiO₂ nanopowder**
By: Scepanovic, M. J.; Grujic-Brojcin, M.; Dohcevic-Mitrovic, Z. D.; et al.
APPLIED PHYSICS A-MATERIALS SCIENCE & PROCESSING Volume: 86 Issue: 3 Pages: 365-371 Published: MAR 2007
7. **Characterization of Anatase TiO₂ Nanopowder by Variable-Temperature Raman Spectroscopy**
By: Scepanovic, M. J.; Grujic-Brojcin, M.; Dohcevic-Mitrovic, Z. D.; et al.
SCIENCE OF SINTERING Volume: 41 Issue: 1 Pages: 67-73 Published: JAN-APR 2009
8. **Photoluminescence of laser-synthesized anatase titanium dioxide nanopowders**
By: Scepanovic, M; Dohcevic-Mitrovic, ZD; Hinic, I; et al.
Edited by: Uskokovic, DP; Milonjic, SK; Rakovic, DI
Conference: 6th Conference of the Yugoslav-Materials-Research-Society Location: Herceg Novi, SERBIA MONTENEG Date: SEP 13-17, 2004
Sponsor(s): Republic Serbia, Minist Sci & Environm Protect; Yugoslav Mat Res Soc
CURRENT RESEARCH IN ADVANCED MATERIALS AND PROCESSES Book Series: MATERIALS SCIENCE FORUM Volume: 494 Pages: 265-270 Published: 2005
9. **Photocatalytic degradation of metoprolol in water suspension of TiO₂ nanopowders prepared using sol-gel route**
By: Scepanovic, Maja; Abramovic, Biljana; Golubovic, Aleksandar; et al.
JOURNAL OF SOL-GEL SCIENCE AND TECHNOLOGY Volume: 61 Issue: 2 Pages: 390-402 Published: FEB 2012
10. **Raman scattering on nanomaterials and nanostructures**
By: Popovic, Z. V.; Dohcevic-Mitrovic, Z.; Scepanovic, M.; et al.
ANNALEN DER PHYSIK Volume: 523 Issue: 1-2 Special Issue: SI Pages: 62-74 Published: JAN 2011

Select Page



Save to Text File

Sort by:

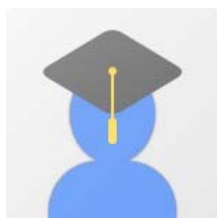
Times Cited -- highest to lowest

Page

1

of 4

35 records matched your query of the 34,653,983 in the data limits you selected.



mira grujic-brojcjin

institute of physics belgrade

Google Scholar

Citation indices

All

Since 2010

Citations

514

416

h-index

13

12

i10-index

15

13

Title 1–47

Cited by

Year

Raman study of structural disorder in ZnO nanopowders

M Šćepanović, M Grujić-Brojčin, K Vojisavljević, S Bernik, T Srećković
Journal of Raman Spectroscopy 41 (9), 914-921

86

2010

The size and strain effects on the Raman spectra of Ce_{1-x}Nd_xO_{2-δ} (0 ≤ x ≤ 0.25) nanopowders

ZD Dohčević-Mitrović, MJ Šćepanović, MU Grujić-Brojčin, ZV Popović, ...
Solid state communications 137 (7), 387-390

76

2006

Infrared study of laser synthesized anatase TiO₂ nanopowders

M Grujić-Brojčin, MJ Sćepanovic, ZD Dohcevic-Mitrovic, I Hinic, B Matovic, ...
JOURNAL OF PHYSICS-LONDON-D APPLIED PHYSICS 38 (9), 1415

54

2005

Characterization of anatase TiO₂ nanopowder by variable-temperature Raman spectroscopy

MJ Šćepanović, M Grujić-Brojčin, ZD Dohčević-Mitrović, ZV Popović
Science of Sintering 41 (1), 67-73

42

2009

Ce_{1-x}Y(Nd)_xO_{2-δ} nanopowders: potential materials for intermediate temperature solid oxide fuel cells

ZD Dohčević-Mitrović, M Grujić-Brojčin, M Šćepanović, ZV Popović, ...
Journal of Physics: Condensed Matter 18 (33), S2061

39

2006

Temperature dependence of the lowest frequency E_g Raman mode in laser-synthesized anatase TiO₂ nanopowder

MJ Šćepanović, M Grujić-Brojčin, ZD Dohčević-Mitrović, ZV Popović
Applied Physics A 86 (3), 365-371

29

2007

Effects of confinement, strain and nonstoichiometry on Raman spectra of anatase TiO₂ nanopowders

M Šćepanović, M Grujić-Brojčin, Z Dohčević-Mitrović, ZV Popović
Materials science forum 518, 101-106

18

2006

Raman scattering on nanomaterials and nanostructures

ZV Popović, Z Dohčević-Mitrović, M Šćepanović, M Grujić-Brojčin, ...
Annalen der Physik 523 (1-2), 62-74

17

2011

Photocatalytic degradation of metoprolol in water suspension of TiO₂ nanopowders prepared using sol-gel route

M Šćepanović, B Abramović, A Golubović, S Kler, M Grujić-Brojčin, ...
Journal of sol-gel science and technology 61 (2), 390-402

16

2012

Defect induced variation in vibrational and optoelectronic properties of nanocrystalline ZnO powders

16

2011

Title	1–47	Cited by	Year
M Šćepanović, M Grujić-Brojčin, K Vojisavljević, T Srečković Journal of Applied Physics 109 (3), 034313			
Photoluminescence of laser-synthesized anatase titanium dioxide nanopowders		16	2005
M Šćepanović, Z Dohčević-Mitrović, I Hinić, M Grujić-Brojčin, G Stanišić, ... Materials Science Forum 494, 265-270			
Structural characterization of mechanically milled ZnO: influence of zirconia milling media		14	2008
K Vojisavljević, M Šćepanović, T Srečković, M Grujić-Brojčin, Z Branković, ... Journal of Physics: Condensed Matter 20 (47), 475202			
Surface modification of sol–gel synthesized TiO₂ nanoparticles induced by La-doping		13	2014
M Grujić-Brojčin, S Armaković, N Tomić, B Abramović, A Golubović, ... Materials Characterization 88, 30-41			
Use of Phonon Confinement Model in Simulation of Raman Spectra of Nanostructured Materials		13	2009
ZVP M. Grujić-Brojčin, M.J. Šćepanović, Z.D. Dohčević-Mitrović Acta Physica Polonica A 116 (1), 51-54			
Infrared study of nonstoichiometric anatase TiO₂ nanopowders		10	2006
M Grujić-Brojčin, M Šćepanović, Z Dohčević-Mitrović, ZV Popović Science of Sintering 38 (2), 183-189			
Temperature-dependent Raman study of Ce_{0.75}Nd_{0.25}O₂–nanocrystals		9	2007
ZD Dohčević-Mitrović, M Radović, M Šćepanović, M Grujić-Brojčin, ... Applied Physics Letters 91, 203118			
Raman study of Ba-doped ceria nanopowders		8	2007
M Radović, Z Dohčević-Mitrović, M Šćepanović, M Grujić-Brojčin, ... Science of Sintering 39 (3), 281-286			
Improved efficiency of sol–gel synthesized mesoporous anatase nanopowders in photocatalytic degradation of metoprolol		7	2013
A Golubović, B Abramović, M Šćepanović, M Grujić-Brojčin, S Armaković, ... Materials Research Bulletin 48 (4), 1363-1371			
Investigation of vibrational and electronic properties of oxide nanopowders by spectroscopic methods		6	2010
M Šćepanović, M Grujić-Brojčin, Z Dohčević-Mitrović, ZV Popović Journal of Physics: Conference Series 253 (1), 012015			
Cd_{1-x}Mn_xS nanoparticles: Far-infrared phonon spectroscopy		5	2005
NŽ Romčević, R Kostić, MJ Romčević, M Grujić-Brojčin, MI Čomor, ... Materials Science Forum 480, 237-242			
Raman study of ZnSe/SiO_x multilayers		4	2007
MJ Šćepanović, M Grujić-Brojčin, I Bineva, D Nesheva, Z Aneva, Z Levi, ...			

Title	1–47	Cited by	Year
JOAM 9, 178-181			
Characterization of ZnSe Nanolayers by Spectroscopic Ellipsometry M Šćepanović, M Grujić-Brojčin, D Nesheva, Z Levi, I Bineva, ZV Popović Acta Physica Polonica A 116 (4), 708-711		3	2009
Dependence of photoluminescence from a-Si nanoparticles on the annealing time and exciting wavelength I Bineva, D Nesheva, M Šćepanović, M Grujić-Brojčin, ZV Popović, Z Levi Journal of luminescence 126 (1), 7-13		3	2007
Optical characterization of laser-synthesized anatase TiO₂ nanopowders by spectroscopic ellipsometry and photoluminescence measurements M Šćepanović, M Grujić-Brojčin, M Mirić, Z Dohčević-Mitrović, ZV Popović Acta Phys Pol A 116, 603-606		2	2009
Far-infrared phonon spectroscopy of Cd_{1-x}MnxS quantum dots R Kostić, NŽ Romčević, MI Čomor, MJ Romčević, M Grujić-Brojčin, ... Materials Science Forum 453, 293-298		2	2004
Photocatalytic degradation of alprazolam in water suspension of brookite type TiO₂ nanopowders prepared using hydrothermal route N Tomić, M Grujić-Brojčin, N Finčur, B Abramović, B Simović, J Krstić, ... Materials Chemistry and Physics 163, 518-528		1	2015
Synthesis of pure and La-doped anatase nanopowders by sol–gel and hydrothermal methods and their efficiency in photocatalytic degradation of alprazolam A Golubović, N Tomić, N Finčur, B Abramović, I Veljković, J Zdravković, ... Ceramics International 40 (8), 13409-13418		1	2014
Vibrational spectroscopy methods in the characterization of nanostructured materials MJ Šćepanović, M Grujić-Brojčin, Z Dohčević-Mitrović, ZV Popović Journal of optoelectronics and advanced materials 9 (1), 30-36		1	2007
Nanopowders characterization using the optical spectroscopy methods ZV Popović, Z Dohčević-Mitrović, M Šćepanović, M Grujić-Brojčin Advances in Science and Technology 45, 327-336		1	2006
Raman and infrared study of nanostructured materials ZD Dohčević-Mitrović, M Šćepanović, I Hinić, M Grujić-Brojčin, G Stanišić, ... XVI National Symposium on Condensed Matter Physics, Sokobanja, 78		1	2004
Vibrational Properties of Single-Wall Nanotubes Based on the Structure of the Molecule C₆₀ R Kostić, D Raković, M Grujić-Brojčin Solid State Phenomena 61, 313-316		1	1998

Title	1–47	Cited by	Year
Influence of some sol-gel synthesis parameters of mesoporous TiO₂ on photocatalytic degradation of pollutants			2015
A Golubović, I Veljković, M Šćepanović, M Grujić-Brojčin, N Tomić, D Mijin, ... Chemical Industry and Chemical Engineering Quarterly, 20-20			
Far-infrared spectroscopic study of CeO₂ nanocrystals			2015
ZV Popović, M Grujić-Brojčin, N Paunović, MM Radonjić, VD Araújo, ... Journal of Nanoparticle Research 17 (1), 1-7			
Synthesis of anatase nanopowders by sol-gel method and influence of temperatures of calcination to their photocatalytic properties			2015
A Golubović, B Simović, M Šćepanović, D Mijin, A Matković, ... Science of Sintering 47 (1), 41-49			
Heterogeneity in iron-doped titania flower-like nanocrystalline aggregates: detection of brookite and anatase/rutile size-strain modeling			2013
PC A. Kremenovic, M. Grujic-Brojcin, A.-M. Welsch Journal of Applied Crystallography 46, 1874-1876			
Raman Study of Vanadium-Doped Titania Nanopowders Synthesized by Sol-Gel Method			2010
M ŠĆEPANOVIĆ, S AŠKRABIĆ, M GRUJIĆ-BROJČIN, A GOLUBOVIĆ, ... International Journal of Modern Physics B 24 (06n07), 667-675			
Defect states in CeO₂. 85Nd (Gd) 0.15 O_{2-δ} nano-crystals investigated by Raman spectroscopy			2009
NŽ Lazarević, ZD Dohčević-Mitrović, MU Grujić-Brojčin, MJ Šćepanović, ... Hemijska industrija 63 (3), 221-226			
Defektna stanja u nanokristalima CeO₂. 85Nd (Gd) 0.15 O_{2-δ} proučavana metodom Raman spektroskopije			2009
N Lazarević, Z Dohčević-Mitrović D, M Grujić-Brojčin, M Šćepanović, ... Hemijska industrija 63 (3), 221-226			
Infrared and Photoluminescence Study of Rapidly Thermally Annealed SiO_x Thin Films			2007
A Milutinović, Z Dohčević-Mitrović, D Nesheva, M Šćepanović, ... Materials science forum 555, 309-314			
Infrared and Photoluminescence Study of Rapidly Thermally Annealed SiO_x Thin Films A. Milutinović, Z. Dohčević-Mitrović, D. Nesheva 2, c, M. Šćepanović			2007
M Grujić-Brojčin, ZV Popović Materials Science Forum 555, 309-314			
Vibrational calculation of single-wall armchair carbon nanotubes of small diameter			2002
M Grujić-Brojčin, R Kostić, D Raković Materials Science Forum 413, 45-48			

Title 1–47

Cited by Year

[Efikasnost brukitnih TiO](#)

NL Finčur, NZ Tomić, MU Grujić-Brojčin, MJ Šćepanović, BF Abramović, ...

[UTICAJ ZAGREVANJA NA FOTOLUMINESCENTNE I RAMAN SPEKTRE ANATAZE TiO₂ NANOPRAHOVA](#)

M ŠĆEPANOVIĆ, M GRUJIĆ-BROJČIN, Z DOHČEVIĆ-MITROVIĆ, I HINIĆ, ...

[Vibrational Spectroscopy Methods as a Powerful Tool for Nanomaterials Characterization](#)

M Šćepanović, Z Dohčević-Mitrović, M Grujić-Brojčin, ZV Popović

[Use of Phonon Confinement Model in Simulation of Raman Spectra of Nanostructured Materials](#)

M Grujić-Brojčin, MJ Šćepanović, ZD Dohčević-Mitrović, ZV Popović

[The Effective Medium Theories in Modeling of Infrared Reflectivity in Inhomogeneous Nanomixtures](#)

M Grujić-Brojčin, M Šćepanović, Z Dohčević-Mitrović, I Hinić, G Stanišić, ...

[PRIMENA BRUGEMANOVE FENOMENOLOŠKE TEORIJE EFEKTIVNE SREDINE U MODELOVANJU INFRACRVENIH SPEKTARA TiO₂ NANOPRAHA](#)

M GRUJIĆ-BROJČIN, M ŠĆEPANOVIĆ, Z DOHČEVIĆ-MITROVIĆ, I HINIĆ, ...

Dates and citation counts are estimated and are determined automatically by a computer program.

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

Број:660-01-00042/410

25.02.2015. године

Београд

ИНСТИТУТ ЗА ФИЗИКУ			
ПРИЈЕМАНО: 20-03-2015			
Ред. бр.	Број	Арх. шифра	Прилог
0801	35111		

На основу члана 22. става 2. члана 70. став 6. и члана 86. став 1. и 2. Закона о научноистраживачкој делатности ("Службени гласник Републике Србије", број 110/05 и 50/06 – исправка и 18/10), члана 2. става 1. и 2. тачке 1 – 4.(прилози), члана 31. став 1., члана 37. и 38. Правилника о поступку и начину вредновања и квантитативном исказивању научноистраживачких резултата истраживача ("Службени гласник Републике Србије", број 38/08) и захтева који је поднео

Институт за физику у Београду

Комисија за стицање научних звања на седници одржаној 25.02.2015. године, донела је

**ОДЛУКУ
О СТИЦАЊУ НАУЧНОГ ЗВАЊА**

Др Мирјана Грујић Бројчин

стиче научно звање

Виши научни сарадник

Реизбор

у области природно-математичких наука - физика

ОБРАЗЛОЖЕЊЕ

Институт за физику у Београду

утврдио је предлог број 948/1 од 15.07.2014. године на седници научног већа Института и поднео захтев Комисији за стицање научних звања број 986/1 од 23.07.2014. године за доношење одлуке о испуњености услова за реизбор у научно звање **Виши научни сарадник**.

Комисија за стицање научних звања је по претходно прибављеном позитивном мишљењу Матичног научног одбора за физику на седници одржаној 25.02.2015. године разматрала захтев и утврдила да именована испуњава услове из члана 70. став 6. и члана 86. став 1. Закона о научноистраживачкој делатности ("Службени гласник Републике Србије", број 110/05 и 50/06 – исправка и 18/10), члана 2. става 1. и 2. тачке 1 – 4.(прилози), члана 31. став 1., 37. и 38. Правилника о поступку и начину вредновања и квантитативном исказивању научноистраживачких резултата истраживача ("Службени гласник Републике Србије", број 38/08) за реизбор у научно звање **Виши 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

Др Станислава Стошић-Грујичић,

научни саветник

С. Стошић-Грујичић

ДРЖАВНИ СЕКРЕТАР

Др Александар Белић



Република Србија
**МИНИСТАРСТВО ЗА НАУКУ И
ТЕХНОЛОШКИ РАЗВОЈ**
Комисија за стицање научних звања

Број:06-00-69/923
14.10.2009. године
Београд

На основу члана 22. става 2. члана 70. став 6. Закона о научноистраживачкој делатности ("Службени гласник Републике Србије", број 110/05 и 50/06 - исправка), члана 2. става 1. и 2. тачке 1 – 4.(прилози) и члана 38. Правилника о поступку и начину вредновања и квантитативном исказивању научноистраживачких резултата истраживача ("Службени гласник Републике Србије", број 38/08) и захтева који је поднео

Институт за физику у Београду

Комисија за стицање научних звања на седници одржаној 14.10.2009. године, донела је

**ОДЛУКУ
О СТИЦАЊУ НАУЧНОГ ЗВАЊА**

Др Мирјана Грујић-Бројчин

стиче научно звање

Виши научни сарадник

у области природно-математичких наука - физика

О Б Р А З Л О Ж Е Њ Е

Институт за физику у Београду

утврдио је предлог број 1071/1 од 14.07.2009. године на седници научног већа Института и поднео захтев Комисији за стицање научних звања број 1088/1 од 17.07.2009. године за доношење одлуке о испуњености услова за стицање научног звања **Виши научни сарадник**.

Комисија за стицање научних звања није прихватила негативно мишљење Матичног научног одбора за физику и на седници одржаној 14.10.2009. године разматрала је захтев и утврдила да именована испуњава услове из члана 70. став 6. Закона о научноистраживачкој делатности ("Службени гласник Републике Србије", број 110/05 и 50/06 - исправка), члана 2. става 1. и 2. тачке 1 – 4.(прилози) и члана 38. Правилника о поступку и начину вредновања и квантитативном исказивању научноистраживачких резултата истраживача ("Службени гласник Републике Србије", број 38/08) за стицање научног звања **Виши 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 за науку и технолошки развој у Београду.

ПРЕДСЕДНИК КОМИСИЈЕ

Др Станислава Стошић-Грујичић,
научни саветник

C. Ant - Pth



РЕПУБЛИКА СРБИЈА



УНИВЕРЗИТЕТ У БЕОГРАДУ
ЕЛЕКТРОТЕХНИЧКИ ФАКУЛТЕТ

ДИПЛОМА

О СТЕЧЕНОМ НАУЧНОМ СТЕПЕНУ
ДОКТОРА НАУКА

ГРУЈИЋ-БРОЈЧИН (Урош) МИРЈАНА

РОЂЕНА 9. МАЈА 1970. ГОДИНЕ У КРАГУЈЕВЦУ, РЕПУБЛИКА СРБИЈА,
ДАНА 28. ЈУЛА 2000. ГОДИНЕ СТЕКЛА ЈЕ АКАДЕМСКИ НАЗИВ
МАГИСТРА ЕЛЕКТРОТЕХНИЧКИХ НАУКА, А 16. ОКТОБРА 2008. ГОДИНЕ
ОДБРАНИЛА ЈЕ ДОКТОРСКУ ДИСЕРТАЦИЈУ НА ЕЛЕКТРОТЕХНИЧКОМ
ФАКУЛТЕТУ ПОД НАЗИВОМ „ОПТИЧКА СПЕКТРОСКОПИЈА
ОКСИДНИХ НАНОПРАХОВА”.

НА ОСНОВУ ТОГА ИЗДАЈЕ ЈОЈ СЕ ОВА ДИПЛОМА О СТЕЧЕНОМ НАУЧНОМ
СТЕПЕНУ

ДОКТОРА ЕЛЕКТРОТЕХНИЧКИХ НАУКА

Редни број из евиденције о издатим дипломама 14829

У Београду, 14. априла 2014. године

ДЕКАН

др Бранко Ковачевић

(М. П.)

РЕКТОР

др Владимир Бумбаширевић