

# НАСТАВНО-НАУЧНОМ ВЕЋУ ФИЗИЧКОГ ФАКУЛТЕТА УНИВЕРЗИТЕТА У БЕОГРАДУ

Пошто смо на четвртој седници Наставно-научног већа Физичког факултета Универзитета у Београду одржаној 29.01.2025. године одређени за чланове Комисије за преглед и оцену докторске дисертације кандидата Андријане Шолајић, мастер инжењера електротехнике и рачунарства, која је предала докторску дисертацију под називом „Испитивање утицаја напрезања на особине хетероструктура дводимензионалних монохалкогенида IIIA групе *ab-initio* методама“, подносимо следећи:

## ИЗВЕШТАЈ

### 1. Основни подаци о кандидату

#### 1.1 Биографски подаци

Андријана Шолајић је рођена 05.05.1991. године у Београду. Завршила је Математичку гимназију 2010. године. Дипломирала је 2016. године на одсеку за Физичку електронику на Електротехничком факултету Универзитета у Београду, на смеру Наноелектроника, оптоелектроника и ласерска техника, одбравивши дипломски рад под називом „Електронска структура напрегнутих графенских нанотачака“. Мастер студије на истом смеру завршила је 2017. године и одбранила мастер тезу под називом „Одређивање електронских и фононских својстава графена допираног стронцијумом и итербијумом ДФТ методом“. Мастер рад је урађен у Центру за физику чврстог стања и нове материјале Института за физику у Београду, у Лабораторији за 2Д материјале, под коменторством др Јелене Пешић, након чега наставља да волонтира у Лабораторији за 2Д материјале. У октобру 2017. године уписује докторске студије на Физичком факултету Универзитета у Београду, ужа научна област Физика кондензоване материје и статистичка физика. У децембру 2018. године изабрана је у звање истраживач приправник, од када је запослена у истој групи у Институту за физику. У јануару 2021. је изабрана у звање истраживач сарадник.

#### 1.2 Научна активност

Андријана Шолајић се бави истраживањем 2Д и слојевитих материјала помоћу теорије функционала густине (ДФТ). Истраживање обухвата анализу електронских, вибрационих и оптичких својстава 2Д материјала и њихових хетероструктура. Током мастер студија, бавила се испитивањем својстава графена допираног са различитим адсорбованим адатомима. Главна тема њеног истраживања током докторских студија је на хетероструктурама монохалкогенида IIIA групе ( $M^{III}X^{VI}$ ) и хексагоналног бор нитрида, (hBN) са посебним фокусом на примену напрезања у циљу оптимизације њихових својстава, попут ширине енергијског процепа, апсорпције, али и механичке стабилности и заштите једнослојних монохалкогенида од утицаја оксидације којој су подложни у контакту са ваздухом. Поред тога, укључена је и у различита истраживања слојевитих ван дер Валсових материјала, фокусирајући се на анализу вибрационих својстава ових материјала помоћу ДФТ-а, упоредо са експерименталним Раман мерењима колега из Центра за физику чврстог стања.

Од децембра 2018. до децембра 2019. године била ангажована на пројектима "Наноструктурни мултифункционални наноматеријали и нанокомпозици (ИИИ450018), под руководством академика Зорана В. Поповића и "Физика уређених наноструктура и нових материјала у фотоници" (ОИ171005) под руководством др Радоша Гајића. Од 2020. године до 2022. године била је учесник ПРОМИС пројекта "StrainedFeSC - Strain effects in iron chalcogenide superconductors" под руководством др Ненада Лазаревића. Учествовала је у међународним пројектима билатералне сарадње: "Modelling and measuring phase transitions and optical properties for perovskites" са Johannes Kepler Универзитетом у Линцу, Аустрија од 2018. - 2020.; "Synthesis and characterization of ternary Van der Waals  $Mo_xW_{1-x}S_2$  nanotubes for advanced field emission application" са Јожеф Стефан Институтом у Љубљани од 2023 - 2025. године.

Тренутно је руководилац пројекта билатералне сарадње са Montanuniversitaet у Леобену у Аустрији, под називом "Exploring spectroscopic fingerprints of defects and dopants in two dimensional magnetic insulators" (2024-2026) и учесник програма мултилатералне сарадње у дунавском региону под називом "Nonthermal Phase transitions in 2D Gallium Sulphide for Applications in Next-Generation Devices" (2023-2025) под руководством др Владимира Дамљановића.

У септембру 2019. године учествовала је у школи "Summer School on Advanced Materials and Molecular Modelling" у Љубљани, где је поред учешћа као полазник, имала и задужење татора на практичним вежбама.

Била је члан организационих одбора неколико конференција: СФКМ 2023., Београд; "The Workshop Strongly Correlated Electron Systems", 9-10. јун 2022., Београд; СФКМ 2019., Београд. Рецензент је неколико радова у међународним часописима: *Physica E: Low dimensional Systems and Nanostructures*, *Electronic Structure*, *Journal of Electronic Materials*, *Journal of Computational Electronics*. Од марта 2024. године је члан одбора за равноправност и диверзитет Центра за физику чврстог стања и нове материјале.

До сада је коаутор на 16 радова у међународним часописима, од чега је први аутор на 5 радова. Учествовала је на вишеструким међународним конференцијама у виду

постер презентација. Цитираност њених радова је 221 према подацима са Google Scholar-a, односно 160 према Web of Science, са  $h$ -индексом 6.

## 2. Опис предатог рада

### 2.1 Основни подаци

Дисертација је урађена под руководством др Јелене Пешић, вишег научног сарадника, која је запослена у Институту за физику у Београду. Ментор испуњава све услове Физичког факултета и Универзитета у Београду за руковођење израдом докторске дисертације: у научном је звању и аутор је великог броја радова из области физике кондензоване материје, објављених у врунским међународним часописима и представљених на бројним међународним конференцијама. Тема докторске дисертације прихваћена је на Колегијуму докторских студија Физичког факултета одржаног 01.12.2021. године, а затим и на седници Наставно-научног већа Физичког факултета одржаног 23.02.2022. године. Веће научних области природно-математичких наука Универзитета у Београду је на седници одржаној 11.04.2022. дало сагласност о прихватању теме докторске дисертације.

Дисертација је написана на српском језику, на 93 стране, не рачунајући насловну страну, захвалницу, сажетак, садржај, библиографију, биографију аутора и изјаве. У тексту се налази 50 слика и 3 табеле, а у библиографији је наведено 207 референци. Дисертација је организована у 6 поглавља.

### 2.2 Предмет и циљ рада

Докторска дисертација припада области физике, ужој научној области кондензоване материје и статистичке физике. Истраживање је усмерено на моделовање нових хетероструктура заснованих на  $M^{III}X^{VI}$  и  $hBN$  слојевима и испитивање њихових механичких, електронских и оптичких својстава применом ДФТ-а.

Дводимензионални  $M^{III}X^{VI}$  се издвајају по изузетним својствима као што су висока покретљивост електрона, способност апсорпције светлости у широком спектру и изразита механичка флексибилност која им омогућава да издрже велике интензитета напрезања и деформације ван равни. Међутим, њихова подложност оксидацији у контакту са ваздухом представља значајно ограничење за експерименталну примену, због чега је неопходна енкапсулација одговарајућим материјалима који обезбеђују ефикасну пасивизацију површине и додатну механичку заштиту. У том контексту, дисертација разматра утицај  $hBN$ -а у хетероструктурама на својства монохалкогенида, са циљем очувања њихових пожељних карактеристика.

Атомски танак слој  $hBN$ -а се већ показао као одлично решење за пасивизацију и заштиту 2Д материјала, а истраживања енкапсулираних слојева  $InSe$  и  $GaSe$  слојева указују на његов значајан допринос механичком ојачању. Фокус дисертације је на примени биаксијалног напрезања у оваквим хетероструктурама, што омогућава

прецизну контролу електронских и оптичких својстава, без нарушавања симетрије материјала. На овај начин могућа је прецизна контрола енергијског процепа и, као последица, побољшање оптичких особина.

Тема дисертације налази се у фокусу савремених истраживања у физици чврстог стања, посебно у контексту брзог развоја и примене 2Д материјала, који због својих јединствених својстава привлаче велику пажњу научне заједнице. Инжењеринг напрезањем се све више истиче као један од кључних приступа у пројектовању нових функционалних материјала, јер омогућава прецизну контролу електронских и оптичких својстава без нарушавања кристалне структуре.

## 2.3 Публикације

Дисертација обухвата резултате три рада публикована у међународним часописима, на којима је кандидат водећи аутор:

[A1] **A. Šolajić**, J. Pešić. "Novel wide spectrum light absorber heterostructures based on hBN/In(Ga)Te", *Journal of Physics: Condensed Matter*. 34(34):345301 (2022). M22, ИФ 2.7, 3 цитата (1 цитат без аутоцитата)

[A2] **A. Šolajić**, J. Pešić, "Tailoring electronic and optical properties of hBN/InTe and hBN/GaTe heterostructures through biaxial strain engineering", *Scientific Reports*, 14(1):1081 (2024). M21, ИФ 3.8, 2 цитата

[A3] **A. Šolajić**, J. Pešić, "Strain-induced modulation of electronic and optical properties in hBN/InSe heterostructure", *Optical and Quantum Electronics*, 56(7):1186 (2024). M22, ИФ 3.3

## 2.4 Преглед научних резултата изложених у тези

Поглавље 1 пружа кратак увод у докторску дисертацију. Друго поглавље садржи теоријски преглед и детаље метода коришћених у истраживању, са детаљнијим освртом на теорију функционала густине и софтверски пакет који је коришћен. У трећем поглављу изложен је опис дводимензионалних монохалкогенида  $M^{III}X^VI$  и преглед постојећих сазнања о истима.

Резултати истраживања представљени су у поглављу 4: У потпоглављу 4.1 описан је начин моделовања испитиваних хетероструктура, могућности за конструкцију јединичне ћелије, поклапање константе решетке и детаљи прорачуна. Потпоглавље 4.2, *hBN/InTe* и *hBN/GaTe* хетероструктуре, бави се испитивањем особина нових hBN/InTe и hBN/GaTe хетероструктура које претходно нигде нису разматране, а резултати овог истраживања објављени су у публикацији [A1]. У потпоглављу 4.3, *Утицај биаксијалног напрезања на hBN/InTe и hBN/GaTe хетероструктуре*, представљени су резултати истраживања утицаја напрезања на претходно разматране hBN/InTe и hBN/GaTe хетероструктуре, објављени у публикацији [A2]. Потпоглавље 4.4, *Утицај напрезања на hBN/InSe хетероструктуре*, односи се на истраживање напрезања у hBN/InSe хетероструктурама чији су резултати објављени у публикацији

[A3]. Резултати истраживања преосталих хетероструктура, hBN/GaS, hBN/GaSe и hBN/InS, изложени су у потпоглављу 4.5 и садрже тренутно непубликоване резултате.

Пето поглавље даје кратак преглед осталих резултата истраживања кандидата остварених током докторских студија а који нису директно везани за тему докторске дисертације, док је у шестом поглављу изложен закључак истраживања.

#### **2.4.1 Моделовање hBN/M<sup>III</sup>X<sup>VI</sup> хетероструктура и избор врсте напрезања**

Приказана је детаљна анализа могућности конструисања хетероструктура заснованих на hBN-у и монохалкогенидима M<sup>III</sup>X<sup>VI</sup> слојевима уз посебан осврт на индуковано напрезање између слојева. Показано је да се јединична ћелија hBN/InTe, hBN/InSe и hBN/GaTe хетероструктура може конструисати на најједноставнији начин, са 10 атома у јединичној ћелији, коју чине слој InTe, GaTe или InSe слоја, и слој hBN суперћелије димензија  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  јединичне ћелије hBN-а. Посебно је истакнута хетероструктура hBN/GaTe у којој је индуковано напрезање на слој hBN-а само 0.3%, а на InTe слој 0.8%, што омогућава једноставанију производњу оваквих структура. За преостале 3 хетероструктуре, неопходна је сложенија јединична ћелија. У овом потпоглављу такође су описани детаљи нумеричких симулација за све три хетероструктуре.

#### **2.4.2 hBN/InTe и hBN/GaTe хетероструктуре**

Радови: [A1]

У првом раду моделоване су две нове хетероструктуре, hBN/InTe и hBN/GaTe. Анализирана је њихова кристална структура и могућност конструкције, уз детаљно разматрање три могућа начина слагања слојева, односно положаја In/Ga атома у односу на атоме hBN-а. Показано је да све три структуре имају негативне енергије везивања, те да њихове електронске структуре остају готово непромењене без обзира на начин слагања. Стога је у истраживању коришћен H-top положај као енергијски најповољнији.

За обе хетероструктуре израчуната је фононска дисперзија, која потврђује њихову динамичку стабилност. Даље су одређене еластичне константе за појединачне слојеве (InTe, GaTe, hBN), а затим и за хетероструктуре. Резултати указују да hBN значајно доприноси механичкој стабилности испитиваних хетероструктура. На пример, Јангов модул појединачних слојева InTe и GaTe износи 42 N/m и 62 N/m, респективно, док у хетероструктурама расте на 322 N/m и 323 N/m. Ово потврђује да присуство hBN-а не само да штити монохалкогениде од оксидације, већ их чини робустнијим и отпорнијим на деформације.

Анализирана је електронска структура, при чему је најзначајнија разлика у односу на појединачне слојеве монохалкогенида уочена у зонској структури hBN/GaTe – енергијски процеп је смањен са 1.59 eV на 0.79 eV. Апсорпција у овим структурама је побољшана у одређеним деловима спектра, покрива видљиви и УВ део спектра, а коефицијент апсорпције је реда величине  $10^5 \text{ cm}^{-1}$ . Додатно, коефицијент рефлексије

се креће између 0 и 25%, што потврђује да се само мали део упадне светлости рефлектује.

### **2.4.3. Утицај биаксијалног напрезања на hBN/InTe и hBN/GaTe хетероструктуре**

Радови: [A2]

Истраживање је фокусирано на утицај биаксијалног напрезања на hBN/InTe и hBN/GaTe хетероструктуре, које не доводи до нарушења симетрије и типа кристалне решетке. Разматране су вредности напрезања од -5% до +5% са кораком од 1%. Резултати истраживања потврђују значај биаксијалног напрезања као моћног алата за прецизну контролу и модификацију особина хетероструктура. Показано је да енергијски процеп расте приликом компресивног напрезања и смањује се приликом истезања, а у посматраном опсегу примењеног напрезања, разлика у енергијском процесу која се може направити је преко 1 eV, што наглашава потенцијал инжењеринга напрезањем за прецизну контролу над електронским својствима. Израчунате су и апсорпције ових хетероструктура за све вредности напрезања, где се види да оптичке особине показују значајну зависност од интензитета напрезања. Уочено је да се апсорпција у видљивом делу спектра повећава са истезањем, док компресија доводи до појачања апсорпције у области од 5 до 10 eV за поларизацију у равни.

### **2.4.4. Утицај напрезања на hBN/InSe хетероструктуре**

Радови: [A3]

У овом делу представљени су резултати истраживања утицаја напрезања на hBN/InSe хетероструктуре. Постојећа литература указује на значај формирања хетероструктуре у односу на једнослојни InSe, укључујући смањени енергијски процеп у односу на InSe, па је фокус истраживања на променама изазваних напрезањем. Уочена је промена положаја врха валентне зоне и дна проводне зоне, као и линеарни тренд промене енергијског процеп са интензитетом напрезања, а као и код претходних хетероструктура апсорпција је реда величине  $10^5 \text{ cm}^{-1}$  у широком делу опсега, а достиже и вредности блиске  $10^5 \text{ cm}^{-1}$ . И овде се види слична промена оптичких особина у односу на примењено напрезање, а посебно побољшање апсорпције не 2.5 до 4.5 eV за поларизацију ван равни.

### **2.4.5 hBN/GaS, hBN/GaSe и hBN/InS хетероструктуре**

Резултати истраживања везаних за преостале три испитиване хетероструктуре су тренутно у припреми за публикацију.

Ове структуре захтевају комплекснију јединичну ћелију која садржи више атома и другачијим поклапањем како би се постигло задовољавајуће индуковано напрезање међу слојевима, што отежава и нумеричке симулације и експерименталну реализацију.

Након оптимизације геометрије, уочено је да у слоју hBN-а долази до одређеног „гужвања“, односно до формирања периодичних купастих издигнућа, која се јављају искључиво под утицајем компресивног напрезања. Промене у енергијском процесу

услед примене напрезања показују сличну зависност као код претходно анализираних хетероструктура. Значајна разлика у зонској структури је уочена код hBN/GaS и hBN/InS хетероструктурама, код којих врх валентне зоне доминантно формирају стања N атома, што није случај код преосталих испитиваних хетероструктура. Оптичке особине показују сличне карактеристике као и код других чланова ове породице, одликујући се високом апсорпцијом у читавом УВ опсегу, која се простира и на видљиви део спектра.

Научни резултати изложени у дисертацији доприносе бољем разумевању утицаја напрезања у 2Д материјалима и хетероструктурама, такође пружају важне смернице за будућа експериментална истраживања.

### 3. СПИСАК ПУБЛИКАЦИЈА КАНДИДАТА

#### А Радови у међународним часописима

Радови [A1], [A2] и [A3] коришћени су у изради докторске дисертације, док су преостали радови резултати истраживања остварених током докторских студија, а који нису директно везани за тему дисертације.

#### Радови у водећим међународним часописима (Импакт фактор > 1)

[A1] **A. Šolajić** & J Pešić, . (2022). Novel wide spectrum light absorber heterostructures based on hBN/In(Ga)Te. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 34(34), 345301–345301. <https://doi.org/10.1088/1361-648X/ac7996> M22, ИФ 2.7

[A2] **Šolajić, A.**, & Pešić, J. (2024). Tailoring electronic and optical properties of hBN/InTe and hBN/GaTe heterostructures through biaxial strain engineering. *Scientific Reports*, 14(1). <https://doi.org/10.1038/s41598-024-51303-4> M21, ИФ 3.8

[A3] **Šolajić, A.**, & Pešić, J. (2024). Strain-induced modulation of electronic and optical properties in hBN/InSe heterostructure. *Optical and Quantum Electronics*, 56(7). <https://doi.org/10.1007/s11082-024-06837-2> M22, ИФ 3.3

[A4] Djurdjić Mijin, S., **Šolajić, A.**, Pešić, J., Liu, Y., Petrović, Č., Bockstedte, M., Bonanni, A., Popović, Z. V., & Lazarević, N. (2023). Spin-phonon interaction and short-range order in Mn<sub>3</sub>Si<sub>2</sub>Te<sub>6</sub>. *Physical Review B*, 107(5). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.107.054309>

[A5] Lazarević, N., Baum, A., Milosavljević, A., Peis, L., Stumberger, R., Bekaert, J., **Šolajić, A.**, Pešić, J., Wang, A., Šćepanović, M., Abeykoon, A. M. M., Milošević, M. V., Petrovic, C., Popović, Z. V., & Hackl, R. (2022). Evolution of lattice, spin, and charge properties across the phase diagram of FeSe<sub>1-x</sub>S<sub>x</sub>. *Physical Review B*, 106(9). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.106.094510>

- [A6] Pešić, J., **Šolajić, A.**, Mitrić, J., Gilić, M., Pešić, I., Paunović, N., & Romčević, N. (2022). Structural and optical characterization of titanium–carbide and polymethyl methacrylate based nanocomposite. *Optical and Quantum Electronics*, 54(6). <https://doi.org/10.1007/s11082-022-03674-z>
- [A7] Djurdjić Mijin, S., Baum, A., Bekaert, J., **Šolajić, A.**, Pešić, J., Liu, Y., He, G., Milošević, M. V., Petrovic, C., Popović, Z., Hackl, R., & Lazarević, N. (2021). Probing charge density wave phases and the Mott transition in 1T-TaS<sub>2</sub> by inelastic light scattering. *Physical Review B*, 103(24). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.103.245133>
- [A8] Milosavljević, A., **Šolajić, A.**, Višić, B., Opačić, M., Pešić, J., Liu, Y., Petrovic, C., Popović, Z. V., & Lazarević, N. (2020). Vacancies and spin-phonon coupling in CrSi<sub>0.8</sub>Ge<sub>0.1</sub>Te<sub>3</sub>. *Journal of Raman Spectroscopy*, 51(11), 2153–2160. <https://doi.org/10.1002/jrs.5962>
- [A9] Đurđić Mijin, S., Abeykoon, A. M. M., **Šolajić, A.**, Milosavljević, A., Pešić, J., Liu, Y., Petrovic, C., Popović, Z. V., & Lazarević, N. (2020). Short-Range Order in VI<sub>3</sub>. *Inorganic Chemistry*, 59(22), 16265–16271. <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.0c02060>
- [A10] **Šolajić, A.**, Pešić, J., & Gajić, R. (2020). Optical and mechanical properties and electron-phonon interaction in graphene doped with metal atoms. *Optical and Quantum Electronics*, 52(3). <https://doi.org/10.1007/s11082-020-02300-0>
- [A11] Damljanović, V., Lazić, N., **Šolajić, A.**, Pešić, J., Nikolić, B., & Damljanović, M. (2020). Peculiar symmetry-protected electronic dispersions in two-dimensional materials. *Journal of Physics. Condensed Matter*, 32(48), 485501–485501. <https://doi.org/10.1088/1361-648x/abaad1>
- [A12] Milosavljević, A., **Šolajić, A.**, Djurdjić-Mijin, S., Pešić, J., Višić, B., Liu, Y., Petrovic, C., Lazarević, N., & Popović, Z. (2019). Lattice dynamics and phase transitions in Fe<sub>3-x</sub>GeTe<sub>2</sub>. *Physical Review B*, 99(21). <https://doi.org/10.1103/physrevb.99.214304>
- [A13] Pestic, J., Popov, I., **Solajic, A.**, Damljanović, V., Hingerl, K., Belic, M., & Gajic, R. (2019). Ab Initio Study of the Electronic, Vibrational, and Mechanical Properties of the Magnesium Diboride Monolayer. *Condensed Matter*, 4(2), 37–37. <https://doi.org/10.3390/condmat4020037>
- [A14] Milosavljević, A., **Šolajić, A.**, Pešić, J., Liu, Y., Petrovic, C., Lazarević, N., & Popović, Z. V. (2018). Evidence of spin-phonon coupling in CrSiTe<sub>3</sub>. *Physical Review B*, 98(10). <https://doi.org/10.1103/physrevb.98.104306>
- [A15] Đurđić Mijin, S., **Šolajić, A.**, Pešić, J. R., Šćepanović, M. J., Liu Y., , Baum A., , Petrovic C., , Lazarević, N. Ž., & Popović, Z. V. (2018). Lattice dynamics and phase transition in CrI<sub>3</sub> single crystals. *Physical Review B*, 98(10). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.98.104307>
- [A16] **Šolajić, A.**, Pešić, J., & Gajić, R. (2018). Ab-initio calculations of electronic and vibrational properties of Sr and Yb intercalated graphene. *Optical and Quantum Electronics*, 50(7). <https://doi.org/10.1007/s11082-018-1541-x>

## **V. Радови у зборницима међународних конференција**

### **Постер презентације**

[B1] Filipović, L., **Šolajić, A.**, & Pešić, J. (2024). Investigation of electronic properties of 1T and 2H phases of 2D GaS. *TWENTY - SECOND YOUNG RESEARCHERS' CONFERENCE MATERIALS SCIENCE AND ENGINEERING December 4 – 6, 2024, Belgrade, Serbia.*

[B2] Belojica, T., Blagojević, J., Djurdjić, S. M., **Šolajić, A.**, Pešić, J., Višić, B., Damljanović, V., Yu Liu, , Petrović, C., Popović, Z. V., Milosavljević, A., & Lazarević, N. (2024). Study of crystal phases and temperature dependence of InSiTe<sub>3</sub>. *22nd Young Researchers' Conference - Materials Science and Engineering - 22 YRC - Program and the Book of Abstracts. Institute of Technical Sciences of SASA2024.*

[B3] Đurđić Mijin, S., **Šolajić, A.**, Milosavljević, A., Yu Liu, , Pešić, J., Petrovic, C., Popović, Z. V., & Lazarević, N. (2024). *Raman Spectroscopy Study of Two-Dimensional van der Waals magnets. International Conference on Physics of Two-Dimensional Crystals 2024.*

[B4] Khasiyeva, A., **Šolajić, A.**, & Pešić, J. (2024). Effect of metal atoms doping on magnetism in talc - 2D natural material. *TWENTY - SECOND YOUNG RESEARCHERS' CONFERENCE MATERIALS SCIENCE AND ENGINEERING December 4 – 6, 2024, Belgrade, Serbia.*

[B5] Tea Belojica, , Milosavljević, A., Đurđić Mijin, S., **Šolajić, A.**, Pešić, J., Višić, B., Yu Liu, , Petrović, Č., Popovic, Z. V., & Lazarevic, N. (2023). Crystal structure and phase transitions in InSiTe<sub>3</sub>. *The 21st Symposium on Condensed Matter Physics - SFKM 2023, Belgrade - Serbia.*

[B6] Pesic, J., **Šolajić, A.**, Milosavljević, A., Djurdjić, S. M., Vasić, B., Paunović, N., & Lazarević, N. (2023). The Evolution of Vibrational Modes of FeSe Under Uniaxial Strain. *21th International Workshop on Computational Physics and Materials Science: Total Energy and Force Methods.*

[B7] Djurdjic, S. M., **Šolajić, A.**, Pešić, J., Y. Liu, , Petrovic, C., M. Bockstedte, , A. Bonanni, , Popović, Z. V., & Lazarević, N. (2023). Lattice dynamics and phase transitions in Mn<sub>3</sub>Si<sub>2</sub>Te<sub>6</sub>.

[B8] **Šolajić, A.**, & Pešić, J. (2023). Strain-induced modulation of electronic and optical properties in hBN/group III monochalcogenide heterostructures. *IX International School and Conference on Photonics - PHOTONICA2023. Photonics Publishing.*

[B9] Pesic, J., **Šolajić, A.**, Milosavljević, A., & Lazarević, N. (2023). Uniaxial Strain-Induced Changes in Vibrational Modes of FeSe. *SFKM 2023 : 21st Symposium on Condensed Matter Physics.*

[B10] Djurdjic, S. M., A. Baum, , J. Bekaert, **Šolajić, A.**, Pešić, J., Y. Liu, , Ge He, , Milošević, M. V., Petrovic, C., Popović, Z. V., R. Hackl, , & Lazarević, N. (2023). Probing charge density wave phases and the Mott transition in 1T-TaS<sub>2</sub> by Raman scattering. *The 21st Symposium on Condensed Matter Physics - SFKM 2023.*

[B11] **Šolajić, A.**, & Pešić, J. (2023). Strain-Controlled Electronic and Optical Properties of hBN/InTe and hBN/GaTe Heterostructures. *The 21st Symposium on Condensed Matter Physics*.

[B12] **Šolajić, A.**, Milosavljević, A., & Lazarević, N. (2023). Evolution Of Vibrational Modes Of FeSe Under Uniaxial Strain. *International Meeting on Superconducting Quantum Materials and Nanodevices*.

[B13] Pešić, J., **Šolajić, A.**, Đurđić Mijin, S., Y. Liu, , C.Petrovic, , M. Bockstedte, , A. Bonanni, , Popović, Z., & Lazarević, N. (2023). Lattice Dynamics in Ferrimagnetic Layered van der Waals Material  $Mn_3Si_2Te_6$ . *Vienna Ab-Initio Simulation Package (VASP) Ecosystem*.

[B14] Milosavljević, A., Đurđić Mijin, S., Tea Belojica, **Šolajić, A.**, Pešić, J., Višić, B., Yu Liu, , Petrović, Č., Popović, Z. V., & Lazarević, N. (2022). Crystal structure of  $InSiTe_3$  studied by Raman spectroscopy. *Twentieth Young Researchers Conference – Materials Science and Engineering*.

[B15] **Šolajić, A.**, & Pesic, J. (2021). Novel hBN/In(Ga)Te Heterostructures For Wide Spectrum Light Absorbers. *The International Symposium on Nanoscale Research September 20th-21st, 2021, Montanuniversitaet Leoben, Austria*.

[B16] Djurdjic, S. M., AM Milinda Abeykoon, **Šolajić, A.**, Milosavljević, A., Pešić, J., Šćečanović, M., Y. Liu, , A. Baum, , Petrovic, C., Lazarević, N., & Popović, Z. V. (2021). Raman Spectroscopy of Quasi-two-dimensional transition metal trihalides. *Nineteenth Young Researchers' Conference Materials Science and Engineering. Belgrade: Institute of Technical Sciences of SASA*.

[B17] Pešić, J. R., & **Šolajić, A.** (2020). Strain effects on vibrational properties in hexagonal 2D materials from the first principles – doped graphene and  $MgB_2$ - monolayer. *Book of Abstracts –Mauterndorf 2020, 21st International Winterschool, New Developments in Solid State Physics, Mauterndorf. Mauterndoft, Salzburg, Austria*.

[B18] Pešić, J. R., **Šolajić, A.**, & Gajić, R. B. (2019). Strain effects on vibrational properties in hexagonal 2D materials from the first principles – doped graphene and  $MgB_2$ - monolayer study. *Knjiga Abstrakata - Simpozijum Fizike Kondenzovane Materije. Beograd, Srbija*.

[B19] Pešić, J. R., & **Šolajić, A.** (2019). Computational study of vibrational properties of chemically exfoliated - titanium carbide MXenes -  $Ti_3C_2$  and  $TiC_2$ . *BOOK OF ABSTRACTS: Quantum ESPRESSO Summer School on Advanced Materials and Molecular Modelling, 1(1), 16–16. Jožef Stefan Institute, Jamova 39, Ljubljana, Slovenia*.

[B20] **Šolajić, A.**, & Pešić, J. R. (2019). Electron-phonon interaction and superconductivity in graphene doped - with metal atoms. *BOOK OF ABSTRACTS: Quantum ESPRESSO Summer School on Advanced Materials and Molecular Modelling. Jožef Stefan Institute, Jamova 39, Ljubljana, Slovenia*.

[B21] Milosavljević, A. N., **Šolajić, A.**, Đurđić Mijin, S., Pešić, J. R., Višić, B., Liu, Y., Petrović, Č., Lazarević, N. Ž., & Popović, Z. V. (2019). Lattice dynamics and phase transitions in

Fe<sub>3-x</sub>GeTe<sub>2</sub>. *SFKM 2019 : 20th Symposium on Condensed Matter Physics : Book of Abstracts. Beograd.*

[B22] **Šolajić, A.**, Pešić, J. R., & Gajić, R. B. (2019). Optical and mechanical properties and electron-phonon interaction in - graphene doped with metal atoms. *PHOTONICA2019: The Seventh International School and Conference on Photonics, 26 August – 30 August 2019, Belgrade, Serbia. Vinča Institute of Nuclear Sciences, Beograd.*

[B23] Đurđić Mijin, S., **Solajic A.**, , Pesic J., , Scepanovic M., , Liu Y., , Baum A., , Petrovic C., , Lazarević, N. Ž., & Popovic V. Zoran, . (2018). Raman Spectroscopy Study on phase transition in CrI<sub>3</sub> single crystals. *Institute of Technical Science of SASA, Beograd.*

[B24] Pešić, J. R., & **Šolajić, A.** (2018). Electron-Phonon Interaction in Monolayer MgB<sub>2</sub> from the First Principles. *School on Electron-Phonon Physics from First Principles. International Centre for Theoretical Physics (ICTP), Trieste, Italy.*

[B25] **Šolajić, A.**, Pešić, J. R., & Gajić, R. B. (2017). Ab-initio calculations of electronic and vibrational properties of Sr and Yb-intercalated graphene. *Photonica 2017. Institut za Fiziku, Univerzitet u Beogradu.*

[B26] **Šolajić, A.**, Pešić, J. R., & Radoš Gajić. (2017). First principle study of Yb and Sr doped monolayer graphene. *The 16th Young Researchers' Conference. Institute of Technical Sciences of the Serbian Academy of Sciences and Arts, Beograd.*

## ЗАКЉУЧАК

На основу свега изложеног, Комисија је закључила да докторска дисертација Андријане Шолајић под називом „Испитивање утицаја напрезања на особине хетероструктура дводимензионалних монохалкогенида IIIA групе *ab-initio* методама“ даје значајан допринос физици чврстог стања и кондензоване материје, и да су задовољени сви потребни услови за одобравање одбране тезе.

Стога, Комисија

## ПРЕДЛАЖЕ

Наставно-научном већу Физичког факултета Универзитета у Београду, да кандидату Андријани Шолајић одобри јавну одбрану докторске дисертације.

У Београду, 20.02.2025.

---

др Божидар Николић, ванредни професор  
Физички факултет Универзитета у Београду

---

др Ђорђе Спасојевић, редовни професор  
Физички факултет Универзитета у Београду

---

др Славица Малетић, ванредни професор  
Физички факултет Универзитета у Београду

---

др Жељко Шљиванчанин, научни саветник  
Институт за нуклеарне науке Винча

---

др Владимир Дамљановић, виши научни сарадник  
Институт за физику у Београду