

# НАСТАВНО-НАУЧНОМ ВЕЋУ ФИЗИЧКОГ ФАКУЛТЕТА УНИВЕРЗИТЕТА У БЕОГРАДУ

Пошто смо на VI седници Наставно-научног Већа Физичког факултета Универзитета у Београду одржаној 29.3.2017. одређени за чланове Комисије за припрему извештаја о докторском раду „*ЕЛЕКТРОНСКА СТРУКТУРА И ТОПОЛОШКА АНАЛИЗА ГУСТИНЕ НАЕЛЕКТРИСАЊА МЕТАЛ–ХИДРИДНИХ СИСТЕМА СА NaCl И РУТИЛ КРИСТАЛНОМ СТРУКТУРОМ*“ из научне области Физика кондензоване материје и статистичка физика, коју је кандидат Бојана Паскаш Мамула предала Физичком факултету у Београду дана 24.3.2017, подносимо следећи

## РЕФЕРАТ

### 1 Основни подаци о кандидату

#### 1.1 Биографски подаци

Кандидат Бојана Паскаш Мамула, рођена је 23.10.1977. у Краљеву, где је завршила Основну школу и Гимназију, природно математички смер 1996. Основне студије завршила је 2005. на Физичком факултету Универзитета у Београду. Дипломирала је на смеру теоријска и експериментална физика, са просечном оценом у току студија 8,85 и оценом 10 на дипломском раду под називом "Анализа временских низова губитака енергије миона космичког зрачења у пластичним сцинтилационим детекторима" на катедри за Нуклеарну физику, под менторством проф. др Ивана Аничина. Након дипломирања била је запослена на месту професора физике у основној и средњој школи од септембра 2005. до фебруара 2010. У току 2009 и 2010 кандидаткиња је волонтирала на Институту за нуклеарне науке Винча, где је стално запослена од 2010 године, у Лабораторији за нуклеарну и плазма физику - Група за локалне структуре и кластере.

#### 1.2 Научна активност

Докторске студије кандидаткиња је уписала 2010. године. Кандидат је учесник на пројекту МПНТ ИИИ45012 – „*Синтеза, процесирање и карактеризација наноструктурних материјала за примену у области енергије, механичког инжењерства,*

заштите животне средине и биомедицине“ и на пројекту МПНТ ИИИ45003 – „Оптоелектронски нанодимензионални системи“. Од јула 2011. до децембра 2015. истраживач је била и учесник „COST“ акције у оквиру МП1103 пројекта – „Nanostructured materials for solid state hydrogen storage“. Област научног рада кандидаткиње су теоријска и експериментална испитивања особина материјала са потенцијалном применом у водоничној енергетици. Учесник је неколико међународних и домаћих радионица и конференција. Била је учесник летње школе „CAMD Summer School – Electronic Structure Theory and Materials Design“ у Копенхагену, Данска, 11-17.08.2012. Била је члан програмског и организационог одбора међународне конференције „The 1<sup>st</sup> European Early Stage Researcher’s Conference on Hydrogen Storage“ одржане у Београду од 3-5. децембра 2012. У оквиру билатералне сарадње са Универзитетом “Universidade Nova de Lisboa”, Лисабон, Португал у периоду 8–15. јула 2014. год. кандидат је учествовала у експерименталним мерењима површина узорака ZnO са примесама Co и Fe техником фотоелектронске спектроскопије X-зрацима и техником спектрометрије Ожеових електрона. Била је члан организационог одбора и учесник радионице *Workshop of French, Croatian and Serbian Researchers on Hydrogen Storage and Energy Related Materials* у Београду од 18 до 19. 10. 2016.

## 2 Опис предатог рада

### 2.1 Основни подаци

Руководилац докторске дисертације је др Никола Новаковић, виши научни сарадник на Институту за нуклеарне науке Винча. Др Новаковић је аутор 14 радова у врхунским међународним часописима у последњих 5 година и тиме испуњава услове неопходне за менторски рад. Сарадник на раду је и др Ненад Ивановић, научни саветник, руководилац Групе за локалне структуре и кластере на Институту за нуклеарне науке Винча. Сви резултати приказани у овом раду део су истраживања која се спроводе у Институту за нуклеарне науке Винча.

Докторска дисертација „ЕЛЕКТРОНСКА СТРУКТУРА И ТОПОЛОШКА АНАЛИЗА ГУСТИНЕ НАЕЛЕКТРИСАЊА МЕТАЛ–ХИДРИДНИХ СИСТЕМА СА NaCl И РУТИЛ КРИСТАЛНОМ СТРУКТУРОМ“ је написана латиницом на српском језику. Састоји се од 5 поглавља са закључком, које укупно имају 114 страна. Рад садржи 39 слика и 9 табела. Укупан број референцираних радова је 102.

## 2.2 Предмет и циљ рада

Докторска дисертација припада ужој научној области физика кондензоване материје и статистичке физике.

Водоник има потенцијал да као најраспрострањенији елемент у природи, али и као супстанца са великом гравиметријском густином енергије буде гориво (или енергетски вектор) будућности. Проблеми везани за комерцијалну употребу водоника као горива су мала волуметријска густина, као и ефикасно и безбедно чување. Складиштење у чврстом стању, пре свега у форми металних хидрида, представља потенцијално решење за безбедно и ефикасно чување водоника, што је један од већих изазова комерцијалној употреби овог елемента као горива и (или) енергетског вектора.

Резултати приказани у овом раду су део вишегодишњих систематских истраживања везаних за водоник као алтернативни извор енергије у Групи за локалне структуре и кластере Института за нуклеарне науке Винча.

Предмет истраживања у овом раду су алкални хидриди са NaCl структуром, заједно са широм класом изоструктурних алкалних халида. Поред њих, предмет истраживања су и системи засновани на хидриду магнезијума са тетрагоналном рутил структуром, допирани са прелазним металима треће периоде. За изучавање поменутих система у овој дисертацији коришћена је теорија функционала густине (DFT). Ова метода омогућава значајно поједностављење проблема вишеелектронских система, какви су квантно механички системи у чврстом стању. Рачунске методе коришћене у овом раду, засноване на теорији функционала густине, једночестичној апроксимацији у оквиру Кон-Шамовог формализма и избору базисног скупа, су метод линеаризованих проширених равних таласа и, у мањој мери, метод пројекторски проширених таласа. За карактеризацију јачине и природе веза у хидридима је коришћен концепт "атома у молекулима" Ричарда Бадера, који је заснован на изучавању тополошких особина векторског поља градијента густине наелектрисања. Ова истраживања пружају увид у механизме који дефинишу интеракције у чистим и примесним метал-хидридним системима и пресудно утичу на стабилност и особине битне за складиштење водоника, пре свега температуру и кинетику сорпције водоника.

Циљ рада је био да се добије детаљан увид у механизме везивања и објасни експериментално уочена (де) стабилизација, снижење температуре и значајно побољшање кинетике сорпције водоника постигнуто допирањем прелазним металима. Разумевање ових механизма би омогућило побољшање особина постојећих, али и дизајнирање будућих материјала са потенцијалном применом за складиштење водоника са добро дефинисаним жељеним особинама. Такође, циљ рада је да се да допринос још увек живој расправи о физичким основама квантне теорије "атома у молекулима" и испита могућност опажаја тополошких прелаза код материјала који се због специфичности кристалне структуре и односа јонских радијуса налазе у близини границе тополошких класа.

## 2.3 Публикације

Кандидат је под менторством др Николе Новаковића објавила два рада у водећем међународном часопису, који су резултат истраживања и рада на докторској тези:

1. Bojana Paskaš Mamula, Jasmina Grbović Novaković, Ivana Radisavljević, Nenad Ivanović, Nikola Novaković. ***Electronic Structure and Charge Distribution Topology of MgH<sub>2</sub> doped with 3d Transition Metals***. International Journal of Hydrogen Energy 39(11):5874-5887 (2014); ISSN: 0360-3199; IF 3.313 (2014) (M21).
2. N. Novaković, Lj. Matović, J. Grbović Novaković, I. Radisavljević, M. Manasijević, B. Paskaš Mamula, N. Ivanović. ***Ab initio calculations of MgH<sub>2</sub>, MgH<sub>2</sub>:Ti and MgH<sub>2</sub>:Co compounds***. International Journal of Hydrogen Energy 35(2):598-608 (2010); ISSN: 0360-3199; IF 4.057 (2010) (M21).

Први рад је цитиран 25 пута, а други рад је цитиран 41 пут. Цитати ових радова су наведени у делу текста са редним бројем 4. Рад у приреми, који је такође део тезе је везан за алкалне халиде и хидриде.

## 2.4 Преглед научних резултата изложених у тези

Резултати докторског рада су подељени према испитиваним системима у два дела:

1. први део се односи на изучавање *алкалних хидрида*, који су због сличности структурних и електронских својстава испитивани заједно са *алкалним халидима*
2. у другом делу су презентовани резултати који се тичу чистог *магнезијум хидрида* и *магнезијум хидрида допираног прелазним металима треће периоде*.

Заједничко за ове две групе система су теоријске методе базиране на прорачунима електронске структуре из првих принципа, базираних на теорији функционала густине и тополошка анализа векторског поља густине наелектрисања у оквирима теорије „атома у молекулима“ (АИМ).

### 2.4.1 Алкални хидриди и халиди

Електронска структура и тополошке особине алкалних хидрида поређене су са широким класом алкалних халида, системима са идентичном кристалном структуром и

умногоме сличним електронским особинама. Сличност особина се пре свега манифестује кроз улогу коју водоник и халогени елементи имају у интеракцији са алкалним металима. Иако припадник исте групе као и алкални метали, водоник због специфичности електронске конфигурације има улогу електронског акцептора, као и халогени елементи. По дужини веза, хидриди очекивано наликују алкалним флуоридима, са великим интервалом у коме се параметер  $\eta$  налази, што је последица велике компресибилности јона водоника. С друге стране, по јоности, због ниже електронегативности више наликују јодидима.

АИМ тополошком анализом и на основу установљеног броја нееквивалентних критичних тачака векторског поља градијента густине наелектрисања ( $n$ ,  $b$ ,  $r$  и  $c$ ) у примитивној ћелији, уведена је класификација према којој су испитивана једињења разврстана у различите тополошке класе. Прорачунима приказаним у овом раду су пронађене две тополошке класе: 2111 и 2211, међу припадницима класа алкалних хидрида и халида. Додатно анјон-анјон везивање је нађено код припадника 2211 класе. Порекло тог наелектрисања је са донора, али није завршило на акцептору, због анјон-анјон одбијања, резонантне је природе, док истовремено компензује (екранира) и катјон-катјон интеракцију.

Кандидати за прелазе из једне у другу тополошку класу односно за постојање тополошких прелазних узрокованих компресијом су LiH, KBr и RbI. Испоставља се да је велика компресибилност јона, а самим тим и адаптивност структуре на сабијање, разлог зашто је овакав прелаз код LiH мало вероватан. Код друга два кандидата се испоставља да су ови прелазни могући, али и вероватно сакривени структурним B1-B2 фазним прелазима при сабијању.

Коришћењем *non-covalent interaction* - NCI формализма, показано је да је NaN нека врста прелазне форме између две тополошке структуре, иако номинално припада класи 2111. Постојање широког платоа између катјона, великог карактеристичног пика неинтерагујућег наелектрисања на привлачној, као и симетричног *rcp* пика на одбојној страни NCI изоповрши иде у прилог тој тврдњи.

#### 2.4.2 MgH<sub>2</sub> и MgH<sub>2</sub> допиран прелазним металима треће периоде

У прорачунима електронске структуре MgH<sub>2</sub> допираног са 3d прелазним металима добијени су карактеристични трендови у структурним, термодинамичким и тополошким параметрима, који бацају светло на јачину и природу интеракције прелазних метала (ПМ) са матрицом MgH<sub>2</sub>. Резултати овог дела тезе су потврђени објављивањем два рада у врхунском међународном часопису (M21) који су наведени у делу текста са ознаком 2.3. Други наведени рад је послужио као увод у истраживање MgH<sub>2</sub> допираном прелазним металима треће периоде (Ti, Co) и на основу њега је и развијена идеја за испитивање допирања прелазним металима целе 3d серије.

Чак и у оквиру овог поједностављеног модела, добијени резултати су у складу са експерименталним опажањима да су најефикаснији у дестабилизацији матрице хидрида (самим тим и у снижењу температуре и убрзању кинетике сорпције водоника) прелазни метали у средини серије. Јачина, природа и последично дужина њихове везе са суседним водониковим атомима је таква да је укупни ефекат такав да слаби остатак матрице  $MgH_2$ , о чему сведочи и редукована енталпија формирања допираних система.

Када говоримо о опаженим трендовима, ПМ-Н и ПМ-Mg дужине веза опадају од Sc и Ti са скоро непопуњеним  $3d$  орбиталама, достижући минимум за Fe и Co. Надаље тренд се мења за касније чланове серије, Cu и Zn са (скоро) попуњеним  $3d$  орбиталама. Растојања ПМ-ннсН1 (наредни најближи суседи) прате супротан тренд указујући да ова атомска љуска компензује пертурбацију узроковану ПМ допантом у  $MgH_2$  решетки. Наиме, положај наредне удаљеније љуске ннсН2, испољава много слабију зависност од врсте ПМ допанта него што је то случај за ближе љуске.

Доминантна улога јонског везивања ПМ-Н интеракције за ПМ од почетка (Sc, Ti) и на крају (Cu, Zn) серије је осликана високим вредностима АИМ наелектрисања и ниским вредностима густине наелектрисања у *везујућим критичним тачкама* (*bcp*). С друге стране, индикације значајнијег ковалентног доприноса у овим системима, посебно за Mn, Fe и Co су:

- ниске вредности АИМ наелектрисања атома,
- висока вредност густине наелектрисања у *bcp*,
- добро слагање између ковалентних радијуса и израчунатих ПМ-Н растојања.

Набројане ставке воде ка закључку да је промена окупације  $3d$  орбитале праћена променом природе ПМ-Н везе, преферентно дужих и јонских интеракција за елементе са почетка и краја серије и краћих и директнијих веза са више локализованог наелектрисања у њима за ПМ из средине серије. По многим аспектима анализе за  $MgH_2:Ni$  се може окарактерисати као гранични случај.

Опажени трендови су омогућени цепањем  $3d$  стања ПМ у њиховом деформисаном координационом октаедру и њиховог мешању. Јан-Телеров ефекат је посебно наглашен за  $MgH_2:Cu$  и води ка формирању два типа Cu-Н интеракција, различитих дужина и карактера.

Добијени резултати обезбеђују слику комплексног узајамног деловања различитих ПМ и водоника у доминантно јонској  $MgH_2$  матрици и задовољавајуће објашњавају уочене трендове међуатомских растојања Mg-Н и јачину интеракције.

Тополошка анализа густине наелектрисања на основу концепта АИМ теорије је изузетан метод којим се на јединствен начин квантификују особине ових сложених система. Њиме се потврђује постојање Н-Н интеракције у  $MgH_2$ , и њено одсуство у првој координацији допираних система, чиме се разјашњава главни механизам дестабилизације  $MgH_2$  прелазним металима. Вредно је истаћи да се параметри АИМ тополошке анализе испитивани у овом раду (величина и облик региона привлачења, број, врста и расподела

критичних тачака, наелектрисање лоцирано у *bcp* и АИМ наелектрисање атома) могу користити у сврху процене и поређења врсте и мере пертурбације која настаје услед увођења нечистоће у одређену матрицу.

### 3 Списак публикација кандидата

#### 3.1 Радови у врхунским међународним часописима

1. N. Novaković, Lj. Matović, J. Grbović Novaković, I. Radisavljević, M. Manasijević, B. Paskaš Mamula, N. Ivanović. ***Ab initio calculations of MgH<sub>2</sub>, MgH<sub>2</sub>: Ti and MgH<sub>2</sub>:Co compounds.*** International Journal of Hydrogen Energy 35:598-608 (2010)
2. Sandra Kurko, Ljiljana Matović, Nikola Novaković, Branko Matović, Zoran Jovanović, Bojana Paskaš Mamula, Jasmina Grbović Novaković. ***Changes of Hydrogen Storage Properties of MgH<sub>2</sub> Induced by Boron Ion Irradiation.*** International Journal of Hydrogen Energy 36(1):1184-1189 (2011) (цитиран 17 пута)
3. Sandra Kurko, Željka Rašković, Nikola Novaković, Bojana Paskaš Mamula, Zoran Jovanović, Zvezdana Baščarević, Jasmina Grbović Novaković, Ljiljana Matović. ***Hydrogen storage properties of MgH<sub>2</sub> mechanically milled with  $\alpha$  and  $\beta$  SiC.*** International Journal of Hydrogen Energy 36(1):549-554 (2011) (цитиран 18 пута)
4. Sanja Milošević, Igor Milanović, Bojana Paskaš Mamula, Anđelka Đukić, Dragan Rajnović, Luca Pasquini, Jasmina Grbović Novaković. ***Hydrogen desorption properties of MgH<sub>2</sub> catalysed with NaNH<sub>2</sub>.*** International Journal of Hydrogen Energy 38(27):12223-12229 (2013) (цитиран 6 пута)
5. Paskaš Mamula B, Grbović Novaković J, Radisavljević I, Ivanović N, Novaković N. ***Electronic structure and charge distribution topology of MgH<sub>2</sub> doped with 3d transition metals.*** International Journal of Hydrogen Energy 39(11):5874-5887 (2014)

#### 3.2 Радови у зборницима међународних конференција

1. Lj. Matović, S. Kurko, Ž. Rašković, B. Paskaš Mamula, Z. Baščarević, N. Novaković, J. Grbović Novaković. ***Improvement of Hydrogen Storage Properties of MgH<sub>2</sub> by  $\alpha$  and  $\beta$ -SiC.*** 12th Annual Conference YUCOMAT 2010 Hotel "Plaža", Herceg Novi, Montenegro, September 6–10, 2010, Programme and The Book of Abstracts pg. 114
2. S. Kurko, B. Paskaš Mamula, Lj. Matović, J. Grbović Novaković, N. Novaković. ***The Influence Of Boron Doping Concentration On MgH<sub>2</sub> Electronic Structure.*** 12th Annual Conference YUCOMAT 2010 Hotel "Plaža", Herceg Novi, Montenegro, September 6–10, 2010 Programme and The Book of Abstracts pg.120

3. J. Grbović Novaković, A. Đukić, B. Paskaš Mamula, N. Novaković, Lj. Matović, Lj. Vulićević, N. Ivanović. ***Microstructure and morphology of natural clay minerals.*** 10th Multinational Congress on Microscopy 2011, Septembar 4-9, 2011, Scientific Campus Urbino University "Carlo Bo", Italy, pg.639
4. N. Novaković, I. Radisavljević, B. Paskaš Mamula, M. Medić, B. Matović, N. Paunović, N. Ivanović. ***Structural investigation of ZnO:Fe doped system.*** 4th international conference on radiation interaction with materials and its use in technologies 2012, Kaunas, Lithuania, 14.05-17.05.2012 pg. 209
5. I. Radisavljević, N. Novaković, H.-E. Mahnke, N. Romčević, B. Paskaš Mamula, M. Manasijević, N. Ivanović. ***Determination of Iron Charge State in Quaternary Diluted Magnetic Semiconductors.*** XVIII Symposium on Condensed Matter Physics-SFKM 2011, 18-22. April 2011, Belgrade, Serbia, SFKM-2011 Book of Abstracts pg.71
6. Bojana Paskaš Mamula, Mirjana Medić, Bojana Kuzmanović, Ivana Radisavljević, Nenad Ivanović, Nikola Novaković. ***Electronic Structure and Charge Topology Study of Alkali Hydrides.*** The First European Early Stage Researchers' Conference on Hydrogen Storage, Belgrade December 3-5, 2012, pg.152
7. Radojka Vujasin, Igor Milanović, Sandra Kurko, Bojana Paskaš Mamula, Nikola Novaković. ***Possible paths of hydrogen diffusion in TiO<sub>2</sub> – role of the surface.*** The First European Early Stage Researchers' Conference on Hydrogen Storage, Belgrade December 3-5, 2012, pg.159
8. Sanja Milošević, Igor Milanović, Bojana Paskaš Mamula, Anđelka Đukić, Ljiljana Matović, Jasmina Grbović Novaković, Luca Pasquini. ***Desorption properties of MgH<sub>2</sub> destabilized with NaNH<sub>2</sub> catalyst.*** The First European Early Stage Researchers' Conference on Hydrogen Storage, Belgrade December 3-5, 2012, pg.160
9. Mirjana Medić, Ivana Radisavljević, Nikola Novaković, Bojana Kuzmanović, Bojana Paskaš Mamula, Nenad Ivanović. ***Local and electronic structure around manganese in multi-component semiconductors.*** The First European Early Stage Researchers' Conference on Hydrogen Storage, Belgrade December 3-5, 2012, pg.99
10. S. Kurko, R. Vujasin, A. Đukić, B. Paskaš Mamula, J. Grbović Novaković, N. Novaković. ***Hydrogen desorption from vacant MgH<sub>2</sub>.*** 12th International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry, Physical Chemistry 2012, 22-26.09.2014, Belgrade, Serbia Proceedings Pg.695-698
11. R. Vujasin, B.P. Mamula, I. Milanović, J. Grbović Novaković, N. Novaković. ***Near-surface hydrogen dynamics in titania.*** 12th International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry, Physical Chemistry 2012, 22-26.09.2014, Belgrade, Serbia Proceedings Pg.745-748
12. B. Paskaš Mamula, J. Grbović Novaković, B. Kuzmanović, N. Ivanović, N. Novaković. ***Nature of Bonding in MgH<sub>2</sub>:TM Doped Systems.*** 9th



- INTERNATIONAL SYMPOSIUM HYDROGEN & ENERGY, 25-30. January 2015, Emmetten, SWITZERLAND 2015, Book of abstracts pg. 68
13. Sandra Kurko, Jasmina Grbović Novaković, Bojana Paskaš Mamula, Igor Milanović, Nenad Ivanović, Nikola Novaković. *Ab initio approach to the metal-hydrogen systems*. Workshop of French, Croatian and Serbian Researchers on Hydrogen Storage and Energy Related Materials, Belgrade, 18-19.10.2016. pg 19
  14. Bojana Paskaš Mamula, Nenad Ivanović, Nikola Novaković. *Electronic Structure of Alkali Hydrides Revisited*. Workshop of French, Croatian and Serbian Researchers on Hydrogen Storage and Energy Related Materials, Belgrade, 18-19.10.2016. pg 20

#### 4. Цитати

Рад под редним бројем 1. у делу 2.3 цитиран је 25 пута у следећим радовима:

1. J. Zhang L.Q. Sun, Y.C. Zhou, P. Peng. *Dehydrogenation thermodynamics of magnesium hydride doped with transition metals: Experimental and theoretical studies*. Computational Materials Science 98:211–219 (2015)
2. J-S. Wang, S-M. Han, L.Y. Shen, W. Zhang. *Hydriding/Dehydriding Properties of an MgH<sub>2</sub>+20%(w) MgTiO<sub>3</sub> Composite*. Acta Physico-Chimica Sinica 30 (12): 2323-2327 (2014)
3. Simone Giusepponi, Massimo Celino. *The role of nickel catalyst in hydrogen desorption from MgH<sub>2</sub>: A DFT study*. International Journal of Hydrogen Energy 40 (30):9326–9334 (2015)
4. M. Lakhal, M. Bhihi, A. Benyoussef, A. El Kenz, M. Loulidi, S. Naji. *The hydrogen ab/desorption kinetic properties of doped magnesium hydride MgH<sub>2</sub> systems by first principles calculations and kinetic Monte Carlo simulations*. International Journal of Hydrogen Energy 40(18):6137–6144 (2015)
5. Kong-Bao Wu, Qun Luo, Shuang-Lin Chen, Qin-Fen Gu, Kuo-Chih Chou, Xun-Li Wang, Qian Li. *Phase equilibria of Ce–Mg–Ni ternary system at 673 K and hydrogen storage properties of selected alloy*. International Journal of Hydrogen Energy 41(3):1725–1735 (2016)
6. Sumita Srivastava, Kuldeep Panwar. *Effect of transition metals on ball-milled MmNi<sub>5</sub> hydrogen storage alloy*. Materials for Renewable and Sustainable Energy 4:19:1-10 (2015)
7. Gaili Sun, Yuanyuan Li, Xinxin Zhao, Yiming Mi, Lili Wang. *First-Principles Investigation of Energetics and Electronic Structures of Ni and Sc Co-Doped MgH<sub>2</sub>*. American Journal of Analytical Chemistry 7:34-42 (2016)
8. Sweta Shriniwasan, Hiya Goswami, Hung-Yu Tien, Mahesh Tanniru, Fereshteh Ebrahimi, Sankara Sarma V. Tatiparti. *Contributions of multiple phenomena towards*

- hydrogenation: A case of Mg*. International Journal of Hydrogen Energy 40(39):13518–13529 (2015)
9. Vasil Koteski, Jelena Belošević-Čavor, Katarina Batalović, Jana Radaković, Ana Umićević. *Hydrogen diffusion in MgH<sub>2</sub> doped with Ti, Mn and Fe*. RSC Advances 5(44): 34894–34899 (2015)
  10. Zeming Yuan, Tai Yang, Wengang Bu, Hongwei Shang, Yan Qi, Yanghuan Zhang. *Structure, hydrogen storage kinetics and thermodynamics of Mg-base Sm<sub>5</sub>Mg<sub>41</sub> alloy*. International Journal of Hydrogen Energy 41(14):5994–6003 (2016)
  11. Lishuai Xi, Jinshan Li, Tiebang Zhang, Hongchao Kou. *Understanding the dehydrogenation process of MgH<sub>2</sub> from the recombination of hydrogen atoms*. International Journal of Hydrogen Energy 41 (13):5716–5724 (2016)
  12. Haipeng Chen, Hao Yu, Qianqian Zhang, Bogu Liu, Pei Liu, Xinpei Zhou, Zongying Han, Shixue Zhou. *Enhancement in dehydriding performance of magnesium hydride by iron incorporation: A combined experimental and theoretical investigation*. Journal of Power Sources 322:179–186 (2016)
  13. Zhen-zhen Wan, Zhong-min Wang, Dian-hui Wang, Yan Zhong, Jian-qiu Deng, Huai-ying Zhou, Chao-hao Hu. *Alloying Effect Study on Thermodynamic Stability of MgH<sub>2</sub> by First-principles Calculation*. Chin. J. Chem. Phys. 29, 545 (2016)
  14. T. Sadhasivam, K. Gurunathan. *The Role of Nanoparticles, Catalytic Additives and Alternative/Advanced Techniques on Magnesium Hydride*. Advanced Science, Engineering and Medicine 7(1) 1-17(17) (2015)
  15. Xinxing Wu, Ruiqi Zhang, Jinlong Yang. *A first-principles study of the thermodynamic and electronic properties of Mg and MgH<sub>2</sub> nanowires*. Phys. Chem. Chem. Phys. 18:19412-19419 (2016)
  16. R. Vujasin, J. Grbović Novaković, N. Novaković, Simone Giusepponi, Massimo Celino. *Ab-initio study of hydrogen mobility in the vicinity of MgH<sub>2</sub>-Mg interface: The role of Ti and TiO<sub>2</sub>*. Journal of Alloys and compounds 696:548-559 (2017)
  17. Sanjay Kumar, S. Yamaguchi, Ankur Jain, Y. Kojima. *Surface modification of MgH<sub>2</sub> by ZrCl<sub>4</sub> to tailor the reversible hydrogen storage performance*. International Journal of Hydrogen Energy 42(9):6152-6159 (2017)
  18. Sanjay Kumar, H. Miyaoka, Takayuki Ichikawa, Y. Kojima. *Micro-alloyed Mg<sub>2</sub>Ni for better performance as negative electrode of Ni-MH battery and hydrogen storage*. International Journal of Hydrogen Energy DOI: 10.1016/j.ijhydene.2016.10.128 (2016)
  19. Elsa Callini, Kondo-Francois Aguey-Zinsou, Rajeev Ahuja, Jose Ramon Ares, Sara Bals, Nikola Biliškov, Sudip Chakraborty, Georgia Charalambopoulou, Anna-Lisa Chaudhary, Fermin Cuevas, Bernard Dam, Petra de Jongh, Martin Dornheim, Yaroslav Filinchuk, Jasmina Grbović Novaković, Michael Hirscher, Torben R. Jensen, Peter Bjerre Jensen, Nikola Novaković, Qiwen Lai, Fabrice Leardini, Daniele Mirabile Gattia, Luca Pasquini, Theodore Steriotis, Stuart Turner, Tejs Vegge,

- Andreas Zuttel, Amelia Montone. *Nanostructured materials for solid-state hydrogen storage: A review of the achievement of COST Action MP1103*. Review Article International Journal of Hydrogen Energy DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.04.025> (2015)
20. S. Milošević, Sandra Kurko, Luca Pasquini, Lj. Matovic, R. Vujasin, N. Novaković, J. Grbović Novaković. *Fast hydrogen sorption from MgH<sub>2</sub>-VO<sub>2</sub>(B) composite materials*. Journal of Power Sources 307:481-488 (2016)
  21. Sanjay Kumar, Anamika Singh, Gyanendra Prasad Tiwari, Yoshitsugu Kojima, Vivekanand Kain. *Thermodynamics and kinetics of nano-engineered Mg-MgH<sub>2</sub> system for reversible hydrogen storage application*. Thermochemica Acta 652: 103–108 (2017)
  22. Sanjay Kumar, Gyanendra Prasad Tiwari. *Thermodynamics and kinetics of MgH<sub>2</sub>-nTa<sub>2</sub>O<sub>5</sub> composite for reversible hydrogen storage application*. Journal of Materials Science 52(12):6962–6968 (2017)
  23. Sanjay Kumar, Anamika Singh, Yoshitsugu Kojima, Gautam Kumar Dey. *Tailoring the Thermodynamics and Kinetics of Mg–Li Alloy for a MgH<sub>2</sub>-Based Anode for Lithium-Ion Batteries*. Energy Technology DOI: 10.1002/ente.201600777 (2017)
  24. T. Sadhasivam and K. Gurunathan. *Role of Nano Sized Particles, Catalytic Additives and Alternative/Advanced Techniques on Magnesium Hydride*. Advanced Science, Engineering and Medicine 6:1–17 (2014)
  25. Yang-Huan Zhang, Ze-Ming Yuan, Wen-Gang Bu, Feng Hu, Ying Cai, Dong-Liang Zhao. *Hydrogen Storage Thermodynamics and Dynamics of Nd–Mg–Ni-Based NdMg<sub>12</sub>-Type Alloys Synthesized by Mechanical Milling*. Acta Metallurgica Sinica 29(6):577–586 (2016)

Рад под редним бројем 2. у делу 2.3 цитиран је 41 пут у следећим радовима:

1. X. Chen, J. Zou, X. Zeng, W. Ding. *Hydrogen storage properties of a Mg-La-Fe-H nano-composite prepared through reactive ball milling*. Journal of Alloys and Compounds 701:208-214 (2017)
2. W. Liu, Y. Qian, D. Zhang, Y. Zeng, X. Han, X. Chu, H. Yin, G. Yang, G. Wang, S. Wu, W. Liu. *A theoretical study of the effects of sp-elements on hydrogen in nickel-based alloys*. Computational Materials Science 128:37-41 (2017)
3. E. German, R. Gebauer. *Hydrogen divacancy diffusion: a new perspective on H migration in MgH<sub>2</sub> materials for energy storage*. Physical Chemistry Chemical Physics 19(2):1174-1180 (2017)
4. M. Abdellaoui, M. Lakhali, M. Bhihi, M. El Khatabi, A. Benyoussef, A. El Kenz, M. Loulidi. *First principle study of hydrogen storage in doubly substituted Mg based hydrides Mg<sub>5</sub>MH<sub>12</sub> (M= B, Li) and Mg<sub>4</sub>BLiH<sub>12</sub>*. International Journal of Hydrogen Energy 41(45): 20908–20913 (2016)

5. E. German, R. Gebauer. *Improvement of Hydrogen Vacancy Diffusion Kinetics in MgH<sub>2</sub> by Niobium- and Zirconium-Doping for Hydrogen Storage Applications*. Journal of Physical Chemistry C 120(9):4806-4812 (2016)
6. V. Verdinelli, A. Juan, J. M. Marchetti, E. Germán. *A microscopic level insight into Pt doped TiZn (001) surface for hydrogen energy storage usage*. RSC Advances 6(77):73566-73575 (2016)
7. W. Liu, Y. Qian, D. Zhang, W. Liu, H. Han. *First-principles calculations of the interaction between hydrogen and 3d alloying atom in nickel*. Journal of Nuclear Materials 465:254-259 (2015)
8. Liu-Ting Wei, Xiong-Ze Pan, Dong-Hai Wu, Hai-Chen Wang, L. Shao, J. Zheng, Bi-Yu Tang. *Effects of single- and co-substitution of Ti on dehydrogenation of Mg<sub>2</sub>NiH<sub>4</sub>: A first-principles study*. Computational Materials Science 103:45–51 (2015)
9. K. Klyukin, M. G. Shelyapina, D. Fruchart. *DFT calculations of hydrogen diffusion and phase transformations in magnesium*. Journal of Alloys and Compounds 644:371-377 (2015)
10. M. Lakhal, M. Bhihi, A. Benyoussef, A. El Kenz, M. Loulidi, S. Naji. *The hydrogen ab/desorption kinetic properties of doped magnesium hydride MgH<sub>2</sub> systems by first principles calculations and kinetic Monte Carlo simulations*. International Journal of Hydrogen Energy 40(18): 6137–6144 (2015)
11. R. Trivedi, D. Bandyopadhyay. *Hydrogen storage in small size Mg<sub>n</sub>Co clusters: A density functional study*. International Journal of Hydrogen Energy 40(37): 12727–12735 (2015)
12. S. Giusepponi, M. Celino. *The role of nickel catalyst in hydrogen desorption from MgH<sub>2</sub>: A DFT study*. International Journal of Hydrogen Energy 40(30): 9326–9334 (2015)
13. КЛЮКИН Константин Александрович. ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ И ПОДВИЖНОСТЬ ВОДОРОДА В ГИДРИДАХ НА ОСНОВЕ МАГНИЯ ПО ДАННЫМ МЕТОДОВ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ. Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико - математических наук САНКТ ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ Санкт Петербург 2015
14. Y. Wang, C. An, Y. Wang, Y. Huang, C. Chen, L. Jiao, H. Yuan. *Core-shell Co@C catalyzed MgH<sub>2</sub>: enhanced dehydrogenation properties and its catalytic mechanism*. Journal of Materials Chemistry A 2(38):16285-16291 (2014)
15. Si-Chen Zhoua, Rong-Kai Pana, Tao-Peng Luo, Dong-Hai Wu, Liu-Ting Weia, Bi-Yu Tanga. *Ab initio study of effects of Al and Y co-doping on destabilizing of MgH<sub>2</sub>*. International Journal of Hydrogen Energy 39(17): 9254–9261 (2014)

16. Y. Wang, S. W. Wu, T. L. Li, S. S. Li, Z. Q. Cao. *Doping with Metal and Compound to Improve the Properties of Hydrogen Storage of MgH<sub>2</sub>*. *Advanced Materials Research* 1015:606-609 (2014)
17. Y. Wang, G. Liu, C. An, L. Li, F. Qiu, Y. Wang, L. Jiao, H. Yuan. *Bimetallic NiCo Functional Graphene: An Efficient Catalyst for Hydrogen-Storage Properties of MgH<sub>2</sub>*. *Chemistry - An Asian Journal* 9(9):2576-2583 (2014)
18. M. Zarshenas, R Ahmed, M. Benali Kanoun, B. ul Haq, A. R. Mat Isa, S. Goumri-Said. *First principle investigations of the physical properties of hydrogen-rich MgH<sub>2</sub>*. *Physica Scripta* 88 (6):065704 (2013)
19. A.H. Reshak. *MgH<sub>2</sub> and LiH metal hydrides crystals as novel hydrogen storage material: Electronic structure and optical properties*. *International Journal of Hydrogen Energy* 38(27):11946–11954 (2013)
20. X. Zhao, S. Hana, X. Zhua, B. Liub, X. Chena, Y. Liua, R. Wang. *Effect of LaH<sub>3</sub>–TiH<sub>2</sub> composite additive on the hydrogen storage properties of Mg<sub>2</sub>Ni alloys*. *Journal of Alloys and Compounds* 581:270–274 (2013)
21. J. Zou, H. Guo, X. Zeng, S. Zhou, X. Chen, W. Ding. *Hydrogen storage properties of Mg–TM–La (TM = Ti, Fe, Ni) ternary composite powders prepared through arc plasma method*. *International Journal of Hydrogen Energy* 38(21):8852–8862 (2013)
22. M. Lakhal, M. Bhihi, H. Labrim, A. Benyoussef, S. Naji, A. Belhaj, B. Khalil, M. Abdellaoui, O. Mounkachi, M. Loulidi, A. El kenz. *Kinetic Monte Carlo and density functional study of hydrogen diffusion in magnesium hydride MgH<sub>2</sub>*. *International Journal of Hydrogen Energy* 38(20):8350-8356 (2013)
23. J. Zou, H. Guo, X. Zeng, S. Zhou, X., W. Ding. *Study on the hydrogen storage properties of core–shell structured Mg–RE (RE= Nd, Gd, Er) nano-composites synthesized through arc plasma method*. *International Journal of Hydrogen Energy* 38(5) :2337–2346 (2013)
24. Radojka Vujasin, Sanja Milošević, Sandra Kurko, Željka Rašković-Lovre, Igor Milanović, Anđelka Đukić, Ljiljana Matović, Jasmina Grbović Novaković. *Hydrogen Storage Challenges of Today*. *Technics, Special Edition* ISSN 0040-2176 (2013)
25. Zeng, X. Q. Cheng, L. FZou, J. X. Ding, W. J. Tian, H. Y. Buckley, C. *Influence of 3d transition metals on the stability and electronic structure of MgH<sub>2</sub>*. *Journal of Applied Physics* 111(9) 093720:1-10 (2012)
26. J. Zou, X. Zeng, Y. Ying, P. Stephane, W. Ding. *Preparation and hydrogen sorption properties of a nanostructured Mg based Mg-La-O composite*. *International Journal of Hydrogen Energy* 37(17):13067-13073 (2012)
27. J. Cermak, L. Kral. *Alloying of Mg/Mg<sub>2</sub>Ni eutectic by chosen non-hydride forming elements: Relation between segregation of the third element and hydride storage capacity*. *Journal of Power Sources* 197:116-120 (2012)

28. THESE DE DOCTORAT. *Simulation Numérique des propriétés d'hydrogène dans les hydrures à base de*. Bhihi Mohamed, 2015
29. J. Zhang, Y.N. Huang, C. Mao, P. Peng. *Synergistic effect of Ti and F co-doping on dehydrogenation properties of MgH<sub>2</sub> from first-principles calculations*. Journal of Alloys and Compounds 538:205–211 (2012)
31. M. Bhihi, M. Lakkhal, H. Labrim, A. Benyoussef, A. El Kenz, O. Mounkach, E. K. Hlil. *Hydrogen storage of Mg<sub>1-x</sub>M<sub>x</sub>H<sub>2</sub> (M= Ti, V, Fe) studied using first-principles calculations*. Chinese Physics B 21(9), 097501 (2012)
32. N. Ivanović, N. Novaković, I. Radisavljević, Lj. Matović, J. Grbović Novaković. *Electronic Principles of Hydrogen Incorporation and Dynamics in Metal Hydrides*. Crystals 2(3):1261-1282 (2012)
33. S. Phetsinorath, Jian-xin Zou, Xiao-qin Zeng, Hai-quan Sun, Wen-jiang Ding. *Preparation and hydrogen storage properties of ultrafine pure Mg and Mg–Ti particles*. Transactions of Nonferrous Metals Society of China 22(8):1849-1854 (2012)
34. G. Xin, J. Yang, C. Wang, J. Zheng, X. Li. *Superior (de)hydrogenation properties of Mg–Ti–Pd trilayer films at room temperature*. Dalton Transactions 41(22):6783-6790 (2012)
35. K. Gopalsamy, M. Prakash, R. Mahesh Kumar, V. Subramanian. *Density functional studies on the hydrogen storage capacity of boranes and alanes based cages*. International Journal of Hydrogen Energy 37(12): 9730–9741 (2012)
36. Dai, J.H., Song, Y., Yang, R. *Intrinsic mechanisms on enhancement of hydrogen desorption from MgH<sub>2</sub> by (001) surface doping*. International Journal of Hydrogen Energy 36(20):12939-12949 (2011)
37. Marina G. Shelyapina, Daniel Fruchart. *Role of Transition Elements in Stability of Magnesium Hydride: A Review of Theoretical Studies*. Solid State Phenomena 170:227-231 (2011)
38. M. Prakash, M. Elango, V. Subramanian. *Adsorption of hydrogen molecules on the alkali metal ion decorated boric acid clusters: A density functional theory investigation*. International Journal of Hydrogen Energy 36(6):3922-3931 (2011)
39. M.G. Shelyapina, D. Fruchart, P. Wolfers. *Electronic structure and stability of new FCC magnesium hydrides Mg<sub>7</sub>MH<sub>16</sub> and Mg<sub>6</sub>MH<sub>16</sub> (M= Ti, V, Nb): An ab initio study*. International Journal of Hydrogen Energy 35(5): 2025-2032 (2010)
40. М.Г. Шеляпина, М.Ю. Сирецкий. *Влияние атомов 3d-металлов на геометрию, электронную структуру и стабильность кластера Mg<sub>13</sub>H<sub>26</sub>*. Физика твердого тела, 2010, том 52, вып. 9
41. M.G. Shelyapina, M. Yu. Siretskiy. *Influence of 3d Metal Atoms on the Geometry, Electronic Structure, and Stability of a Mg<sub>13</sub>H<sub>26</sub> Cluster*. Physics of the Solid State 52(9):1992–1998 (2010)

## Закључак

У приложеној докторској дисертацији су успешно објашњени примећени трендови особина чистих и допираних метал-водоник система помоћу резултата прорачуна електронске структуре и анализом специфичних тополошких особина електронске густине наелектрисања. Показано је да коришћење једноставних структурних модела омогућава успешну предикцију особина постојећих и хипотетичких материјала у области водоничне енергетике. Добијени резултати су објављени у два рада у врхунским часописима из физике који су до сада цитирани преко 60 пута.

На основу изложеног, комисија је закључила да докторски рад „*ЕЛЕКТРОНСКА СТРУКТУРА И ТОПОЛОШКА АНАЛИЗА ГУСТИНЕ НАЕЛЕКТРИСАЊА МЕТАЛ – ХИДРИДНИХ СИСТЕМА СА NaCl И РУТИЛ КРИСТАЛНОМ СТРУКТУРОМ*“ који је предала кандидат Бојана Паскаш Мамула даје значајан допринос области физике кондензоване материје и статистичке физике, и да су задовољени сви прописани услови за одобравање одбране тезе. Стога, предлажемо Научно-наставном већу Физичког факултета да одобри њену одбрану.

Београд, 24.4.2017.год.

Комисија:



Др Никола Новаковић, виши научни сарадник,

Институт за нуклеарне науке Винча



Проф. др Милан Дамњановић, редовни професор,

Физички факултет, Универзитет у Београду



Доц. др Михајло Ваневић, доцент,

Физички факултет, Универзитет у Београду