

NASTAVNO-NAUČNOM VEĆU FAKULTETA ZA FIZIČKU HEMIJU

Na I redovnoj sednici Nastavno-naučnog veća Fakulteta za fizičku hemiju, održanoj **15.10.2015.** godine, imenovani smo u Komisiju za pregled i ocenu doktorske disertacije master fizikohemičara Sandre Kurko (rođene Kumrić), istraživača saradnika Instituta za nuklearne nauke „Vinča“ Univerziteta u Beogradu, pod naslovom: „**Uticaj modifikacije strukture MgH₂ borom na proces dehidriranja**“. Pošto smo pregledali doktorsku disertaciju podnosimo Nastavno-naučnom veću sledeći

IZVEŠTAJ

A. Prikaz sadržaja disertacije

Doktorska disertacija Sandre Kurko napisana je na 132 strane kucanog teksta i sadrži sledeća poglavlja: *Uvod* (34 strane), *Cilj rada* (2 strane), *Teorijsko-eksperimentalni deo* (32 strane), *Rezultati i diskusija* (48 strana), *Zaključak* (6 strana) i *Literatura* (155 referenci, 10 strana). Kandidat je uz tekst disertacije priložio i spisak radova proisteklih iz doktorske disertacije (3 strane), Biografiju (2 strane) i dodatke propisane pravilima Univerziteta o podnošenju doktorskih teza na odobravanje.

Rad sadrži ukupno 50 slika (21 slika iz postojeće literature, 29 slika predstavlja vlastite rezultate) i 16 tabela od čega su 3 tabele preuzete iz dostupne naučne literature, a 13 je sadržano u poglavljima *Teorijsko-eksperimentalni deo* i *Rezultati i diskusija* i predstavlja naučni doprinos kandidata.

U poglavlju *Uvod* su prikazane osnove vodonične energetike i različitih načina skladištenja vodonika. Kao materijal za skladištenje vodonika istaknut je magnezijum hidrid (MgH₂). Prezentovana su različita fizikohemijska svojstva MgH₂ važna za njegovu primenu kao materijala za skladištenje vodonika kao što su kristalna struktura, priroda veze, mehanizam njegovog građenja i razgradnje i termodinamičke i kinetičke osobine navedene u literaturi. Prikazan je pregled kvantnomehaničkih *ab initio* proračuna strukture nedopiranog i dopiranog MgH₂ korišćenjem teorije funkcionala gustine naelektrisanja (DFT). Ispitivan je uticaj dopanta na strukturu i termodinamička i kinetička svojstva hidrida. Takođe su predstavljeni do sada postignuti eksperimentalni rezultati modifikacije MgH₂ destabilizacijom kristalne strukture mehaničkim mlevenjem sa i bez aditiva i jonskim ozračavanjem. U okviru ovog poglavlja posebna pažnja je posvećena modifikaciji MgH₂ ozračavanjem jonima Ar⁸⁺ i Xe⁸⁺ i efektima koje takva modifikacija ima na mikrostrukturna i desorpciona svojstva datog materijala.

Poglavljje *Teorijsko-eksperimentalni deo* podeljen je na dve celine. U prvom delu su opisane osnove DFT metode, topološke analize gustine naelektrisanja i metode napregnute elastične trake (NEB) kojom se određuje reakciona putanja minimalne energije i dati detalji *Abinit* proračuna. Drugi deo se odnosi na opis eksperimentalnih metoda korišćenih za modifikaciju i analizu materijala u ovom radu i uslove merenja. Modifikacija materijala urađena je ozračavanjem jonima B³⁺ energije 45keV i različitih fluenci na jonskom izvoru FAMA u Institutu za nuklearne nauke „Vinča“. Priroda i profil interakcije upadnih jona sa materijom su procenjeni Monte Karlo simulacijom (SRIM proračunima). Strukturna karakterizacija je urađena pomoću rendgenostrukturne analize (XRD), skenirajuće elektronske mikroskopije (SEM) i laserske metode za određivanje raspodele veličine čestica (PSD), dok je za praćenje procesa dehidriranja korišćena temperaturno programirana desorpcija (TPD). Opisana je metoda kinetičke analize dobijenih termodesorpcionih spektara pomoću softvera napisanog u istraživačkoj grupi u kojoj je kandidat zaposlen u Institutu za nuklearne nauke „Vinča“.

U poglavlju *Cilj rada* istaknuta je namera ove disertacije, a to je da se DFT proračunima i modifikacijom materijala jonima B³⁺ energije 45keV, različitih fluenci detaljno ispita kakve efekte ima dopant na proces dehidriranja magnezijum hidrida. Cilj proračuna u kojima bor

supstituiše Mg u rešetki MgH_2 je da se utvrdi da li postoji stabilna konfiguracija dopiranog sistema i sa kojom količinom dodatog bora. Sa druge strane, cilj je da se odredi na koji način interakcija atoma u dopiranom sistemu u poređenju sa nedopiranim hidridom utiče na difuziju vodonika, vakancija i na desorpciju atoma vodonika sa površine hidrida. Ozračavanjem jonima B^{3+} energije 45 keV i fluenci 10^{12} , 10^{15} i 10^{16} jona/cm² u MgH_2 se unosi kontrolisana količina defekata i dopanta na određenu dubinu uzorka. Cilj je da se jonskim ozračavanjem destabiliše struktura hidrida i uvede bor u njegov površinski sloj i da se kod tako modifikovanih uzoraka odredi mehanizam reakcije dehidriranja i njegova zavisnost od fluence upadnih jona.

Poglavlje *Rezultati i diskusija* je podeljeno u dve celine. U prvom delu su obrađeni rezultati DFT proračuna elektronske strukture hidrida i hidrida modifikovanog uvođenjem bora u njegovu strukturu. Urađeni su proračuni elektronske strukture zapremine hidrida, odnosno proračuni kojima je simulirana unutrašnjost faze MgH_2 dok je bor uveden supstitucijom Mg u različitim koncentracijama. Zasebno su izvedeni proračuni elektronske strukture površine u kojima je simulirana (110) ravan MgH_2 , a bor uveden u drugom atomskom sloju (prvom koji sadrži atome Mg). U proračunima zapremine ispitivana je termodinamička stabilnost MgH_2 dopiranog različitim koncentracijama bora, uticaj bora na koheziju hidrida i razlike u difuziji vodonika u nedopiranom i dopiranom sistemu. Simulacijom površine je praćena zavisnost energije desorpcije vodonika od zasićenosti i konfiguracije površine i udaljenosti desorbovanog atoma vodonika od površine u nedopiranom i površinski dopiranom MgH_2 . U drugom delu ovog poglavlja dati su rezultati modifikacije MgH_2 jonima B^{3+} energije 45 keV i različitih fluenci. Način na koji ovi joni interaguju sa MgH_2 procenjeni su SRIM proračunima. Analiziran je fazni sastav ozračenog materijala, njegova morfologija i raspodela veličine čestica. Prikazane su zavisnosti temperature desorpcije vodonika od primenjene fluence upadnih jona i urađena kinetička analiza neizotermских termodesorpcionih krivih.

U poglavlju *Zaključak* su sumirani ključni rezultati istraživanja u okviru teze.

B. Opis rezultata teze

U okviru ove doktorske disertacije ispitan je uticaj elementarnog bora na proces dehidriranja MgH_2 . Pokazano je da uvođenje bora u strukturu MgH_2 dovodi do destabilizacije strukture i smanjenja entalpije formiranja hidrida, koja opada sa porastom koncentracije bora. Jedino termodinamički stabilno jedinjenje među ispitivanim je $\text{Mg}_{15}\text{BH}_{32}$ u kojem je koncentracija dodatog bora najmanja. Uočeno je da sa porastom koncentracije bora dolazi do širenja visokoenergijskih stanja bora smeštenih unutar zabranjene zone MgH_2 i promene elektroprovodnih osobina dopiranih sistema. Sa porastom koncentracije bora, dolazi i do smanjenja rastojanja između bora i vodonika i porasta distorzije prvog koordinacionog poliedra. Za razliku od interakcije između magnezijuma i vodonika koja je dominantno jonskog karaktera, interakcija između bora i vodonika je dominantno kovalentna. Gustina naelektrisanja u vezujućoj kritičnoj tački između B i H u $\text{Mg}_{15}\text{BH}_{32}$ iznosi $0,3 \text{ e}/\text{Å}^3$ i primetno je veća od odgovarajuće gustine između Mg i H ($0,19 \text{ e}/\text{Å}^3$), što je indicacija jače veze između bora i vodonika.

Energija formiranja vodonične vakancije u MgH_2 iznosi 1,82 eV, dok je energija aktivacije za njenu difuziju 0,64 eV. U slučaju $\text{Mg}_{15}\text{BH}_{32}$ posmatrane su četiri neekvivalentne vakancije koje su formirane na različitoj udaljenosti od bora. Dobijene energije formiranja vakancija iznose 0,96, 1,36, 1,67 i 1,67 eV u smeru približavanja nastale vakancije boru. Poslednje dve vakancije koje imaju istu energiju formiranja nastaju otpuštanjem atoma vodonika koji su bili na rastojanjima 1,476 Å i 1,544 Å od bora. Energija aktivacije za difuziju vakancija takođe zavisi od njihove udaljenosti od bora, ali i od smera difuzije. U smeru difuzije ka boru vrednosti ove energije su 0,294, 0,399 i 0,405 eV, a u smeru udaljavanja od bora vrednosti iznose 0,405, 0,436 i 0,346 eV. Sve ispitivane vakancije u dopiranom sistemu imaju značajno nižu energiju formiranja i difuzionu energiju aktivacije od vakancije u nedopiranom hidridu.

Površinski efekti i desorpcija vodonika sa čistog i MgH_2 dopiranog borom praćeni su sa (110) kristalografske ravni. Najveća energija je potrebna za desorpciju vodonikovog atoma kada je

površina hidrida njime zasićena, tj. za uklanjanje prvog atoma sa površine. Energija desorpcije u sledećim koracima je niža, a njena vrednost zavisi od konfiguracije u kojoj se desorbovani atomi vodonika nalaze. U drugom koraku je energijski najpovoljnija desorpcija vodonikovog atoma koji se nalazi u drugom atomskom sloju, dok je već desorbovani atom iz prvog atomskog sloja njegov najbliži sused. U MgH_2 koji je površinski dopiran borom, energija desorpcije prvog vodonikovog atoma je za oko 0,67 eV niža nego u čistom MgH_2 . Energija za desorpciju drugog atoma je nešto veća u dopiranom sistemu, ali je njena zavisnost od konfiguracije ista kao u nedopiranom hidridu. Za desorpciju trećeg atoma vodonika sa površine (zasićenost 25%) je u svim posmatranim konfiguracijama potrebna niža energija u dopiranom u odnosu na nedopirani hidrid. Najniža energija potrebna za desorpciju trećeg atoma u nedopiranom MgH_2 iznosi 2,78 eV, a u dopiranom 0,84 eV. Pokazano je, takođe da u nedopiranom MgH_2 dolazi do monotnog rasta energije formiranja vodonične monovakancije sa njenom udaljenošću od površine i da njena vrednost zavisi od zasićenosti površine vodonikom. Izuzetak od monotnog rasta predstavlja vakancija u drugom sloju, za koju je potrebna nešto veća energija. Sa druge strane, u dopiranom sistemu ove energije su dosta niže, ali je i njihova zavisnost od dubine drugačija. NEB proračunima su dobijene energije aktivacije za proces desorpcije molekula vodonika sa (110) površi MgH_2 . Za desorpciju molekula vodonika, gde se desorbuju najbliži vodonikovi atomi iz prvog atomskog sloja, energija aktivacije iznosi 2,21 eV, dok u konfiguraciji u kojoj se jedan desorbovani atom nalazi u prvom, a drugi u drugom atomskom sloju (i međusobno su najbliži susedi) iznosi 1,76 eV. Osim od konfiguracije desorbovanih atoma vodonika, u dopiranom sistemu energija aktivacije zavisi i od njihove udaljenosti od bora. Tako je u slučaju desorpcije ekviplanarnih atoma vodonika energija aktivacije 3,84 eV za atome bliže boru i 2,17 eV za atome na većem rastojanju od bora. U konfiguraciji u kojoj se atomi nalaze u različitim ravnima, aktivaciona barijera iznosi 1,86 eV za bliže i 1,72 eV za dalje atome vodonika.

Prilikom ozračavanja MgH_2 jonima B^{3+} dominantni mehanizam gubitka energije upadnih jona je kroz jonizaciju atoma mete. Broj nastalih vakancija po upadnom jonu iznosi 288, a najviše ih se deponuje na dubini od 160 nm, što odgovara dubini od dva do tri srednja prečnika kristalita ozračenog MgH_2 . Rendgenostrukturnom analizom je utvrđeno da prilikom ozračavanja MgH_2 , usled nastanka velikog broja defekata u strukturi, dolazi do pojave $Mg(OH)_2$. Veličina kristalita u čistom MgH_2 iznosi 83 nm, dok je u ozračenim uzorcima 54 nm ukoliko je fluenca upadnih jona 10^{12} jona/cm² i 76 nm pri fluenci od 10^{15} i 10^{16} jona/cm². Dolazi i do delimične amorfizacije hidrida koja je najizraženija kada je fluenca upadnih jona 10^{15} jona/cm². Metodom rasejanja laserskog snopa je pokazano da ozračavanje jonima dovodi do smanjenja srednje veličine čestica, sa polaznih 38 μm na 14-22 μm , u zavisnosti od fluence upadnih jona. Takođe, dolazi do porasta broja čestica sa dijametrom manjim od 5 μm . Na SEM mikrofografijama se uočava da ozračavanje jonima B^{3+} dovodi do smanjenja veličine aglomerata sa 10-100 μm u netretiranom, na 2-20 μm u ozračenom MgH_2 . Aglomerati u ozračenom hidridu imaju nepravilnu strukturu sa izraženim fragmentima.

Temperaturno programirana desorpcija pokazuje dva maksimuma i u ozračenom i u neozračenom MgH_2 . Visokotemperaturni maksimum potiče od desorpcije molekula vodonika i ozračavanje jonima B^{3+} dovodi do njegovog pomeranja sa 706 K u netretiranom hidridu na 686 K pri fluenci 10^{12} jona/cm² i na 678 K pri fluencama od 10^{15} i 10^{16} jona/cm². Niskotemperaturni maksimum se u netretiranom hidridu nalazi na 550 K i potiče od desorpcije OH^- jona i vode, dok se u ozračenom hidridu nalazi na oko 515 K i dodatno potiče od desorpcije BH_4^- jona. Proces dehidriranja MgH_2 je kako u netretiranom hidridu tako i u ozračenim uzorcima najbolje opisan kinetičkim modelom Avrami-Erofejeva (*Avrami-Erofeev*). Međutim u netretiranom i hidridu ozračenom jonima fluence 10^{16} jona/cm² Avramijev parametar n iznosi 3, dok je u hidridu ozračenom jonima fluence 10^{12} i 10^{15} jona/cm² njegova vrednost 4. Pokazano je da stvoreni defekti i promene u strukturi nastale ozračavanjem jonima B^{3+} dovode do znatnog smanjenja prividne energije aktivacije za desorpciju vodonika u odnosu na netretirani hidrid u kom iznosi 372 kJ/mol H_2 . Pri fluenci upadnih jona B^{3+} od 10^{12} jona/cm², prividna energija aktivacije za desorpciju vodonika iznosi 283 kJ/ mol H_2 , dok je pri fluenci od 10^{15} jona/cm² njena vrednost 172 kJ/ mol H_2 . U ozračenom MgH_2 dolazi do razaranja površinskog pasivacionog sloja i do promene reakcionog

mehanizma bilo usled promene karaktera nukleacije. Jonsko ozračavanje unelo je u površinski sloj materijala veliki broj katalitički aktivnih vakancija i jone bora koji su zajedno doveli do povećanja broja centara nukleacije. Međutim pri fluenci upadnih jona od 10^{16} jona/cm² energija aktivacije za desorpciju vodonika je dosta veća i njena vrednost od 373 kJ/mol H₂ kao i reakcioni mehanizam slični su netretiranom hidridu. Ovo je posledica nastanka vrlo aktivne površine koja brzo hidrolizuje. Ponovna pasivacija u ovom slučaju utiče samo na kinetiku reakcije, ali ne i na temperaturu na kojoj ona počinje, što ukazuje na značaj veličine čestica materijala.

C. Uporedna analiza rezultata teze sa rezultatima iz literature

U tezi je DFT metodom pokazano da su vrednosti parametara jedinične ćelije i entalpije formiranja hidrida, kao i interakcija između magnezijuma i vodonika u MgH₂ bliske vrednostima navedenim u literaturi za isti sistem [R. Yu, P. Lam, *Phys. Rev. B*, vol. 37, pp. 8730–8737, 1988; B. Paskaš Mamula, J. Grbović Novaković, I. Radisavljević, N. Ivanović, N. Novaković, *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 39, pp. 5874–5887, 2014; S. Er, D. Tiwari, G. A. de Wijs, G. Brocks, *Phys. Rev. B*, vol. 79, p. 024105, 2009;]. Takođe je pokazano da supstitucija Mg u rešetki MgH₂ borom u malom procentu dovodi do snižavanja entalpije formiranja hidrida i njegove destabilizacije. Sličan efekat primećen je i ukoliko je Mg supstituisan Ni, Ti, Mn, Co, Nb, V i Fe [S. Li, P. Jena, R. Ahuja, *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.*, vol. 74, pp. 1–4, 2006; D. Zhou, P. Peng, J. Liu, *Sci. China Ser. E*, vol. 49, pp. 129–136, 2006; S. Giusepponi, M. Celino, *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 38, pp. 15254–15263, 2013; J. H. Dai, Y. Song, R. Yang, *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 36, pp. 12939–12949, 2011; N. Novaković, J. Grbović Novaković, Lj. Matović, M. Manasijević, I. Radisavljević, B. Paskaš Mamula, N. Ivanović, *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 35, pp. 598–608, 2010;]. Energija potrebna za formiranje vodonične vakancije u sistemu dopiranom borom dobijena u tezi iznosi 0,96-1,67 eV u zavisnosti od njenog položaja u odnosu na atom bora, dok u nedopiranom MgH₂ iznosi 1,96 eV [M. Park, A. Janotti, C. Van de Walle, *Phys. Rev. B*, vol. 80, pp. 1–5, 2009;]. Takođe, u dopiranom sistemu ispitivanom u tezi je niža i energija aktivacije za proces difuzije vodonične vakancije koja iznosi 0,294-0,436 eV, dok je u nedopiranom hidridu njena vrednost 0,6-0,8 eV [A. J. Du, S. C. Smith, G. Q. Lu, *J. Phys. Chem. C*, vol. 111, pp. 8360–8365, 2007; S. Hao, D. S. Sholl, *Appl. Phys. Lett.*, vol. 93, pp. 3–6, 2008;]. Simulacijom reakcije dehidriranja MgH₂ dobijeno je da energija aktivacije ove reakcije zavisi od posmatrane ravni hidrida i od kristalografskih pozicija atoma vodonika koji se desorbuju [M. Park, A. Janotti, C. Van de Walle, *Phys. Rev. B*, vol. 80, pp. 1–5, 2009; A. Du, S. Smith, X. Yao, G. Lu, *Surf. Sci.*, vol. 600, pp. 1854–1859, 2006;]. Najmanja aktivaciona barijera od 172 kJ/molH₂ se postiže prilikom otpuštanja jednog površinskog vodonika i njegovog najbližeg suseda iz sledećeg atomskog sloja sa (110) kristalografske ravni MgH₂ [A. J. Du, S. C. Smith, X. D. Yao, G. Q. Lu, *Surf. Sci.*, vol. 600, pp. 1854–1859, 2006;]. Proračunima u tezi je za nedopiran MgH₂ dobijena energija aktivacije od 170 kJ/molH₂, dok za hidrid dopiran borom ona iznosi 179 kJ/molH₂ ukoliko su desorbovani atomi vodonika u prvoj koordinacionoj sferi bora, a 166 kJ/molH₂ ukoliko nisu.

Bombardovanjem MgH₂ jonima B³⁺ energije 45 keV i fluence 10^{12} i 10^{15} jona/cm² prividne energije aktivacije za desorpciju vodonika iz neaktiviranog MgH₂ je znatno smanjena [N. Hanada, T. Ichikawa, H. Fujii, *J. Phys. Chem. B*, vol. 109, pp. 7188–7194, 2005; T. R. Jensen, A. Andreasen, T. Vegge, J. W. Andreasen, K. Ståhl, A. S. Pedersen, M. M. Nielsen, et al., *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 31, pp. 2052–2062, 2006;]. Takođe je došlo i do promene karaktera nukleacije tako da prethodno konstantan broj centara nukleacije u netretiranom MgH₂ počinje da raste konstantnom brzinom [F. Leardini, J. R. Ares, J. Bodega, J. F. Fernández, I. J. Ferrer, C. Sánchez, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, vol. 12, pp. 572–577, 2010;]. Promena karaktera nukleacije bombardovanog hidrida, zajedno sa značajnim smanjenjem prividne energije aktivacije može biti posledica razaranja pasivirajućeg hidroksidnog sloja, ali takođe i nastanka katalitički aktivnih vakancija koje nastaju prilikom desorpcije vodonika iz MgH₂ na čijoj površini je prisutan hidroksid

[A. Borgschulte, M. Biemann, A. Züttel, G. Barkhordarian, M. Dornheim, and R. Bormann, *Appl. Surf. Sci.*, vol. 254, pp. 2377–2384, 2008;].

Za razliku od MgH₂ bombardovanog jonima Xe⁸⁺ i Ar⁸⁺ energije 120 keV i fluence 10¹²-10¹⁶ u kom do izdvajanja vodonika dolazi na tri različite temperature usled formiranja znatne količine Mg(OH)₂, vodonik se iz hidrida bombardovanog jonima B³⁺ izdvaja u jednom koraku [Lj. Matović, N. Novaković, S. Kurko, M. Šiljegović, B. Matović, Z. Kačarević Popović, N. Romčević, N. Ivanović, J. Grbović Novaković, *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 34, pp. 7275–7282, 2009; J. Grbović Novaković, Lj. Matović, M. Drvendžija, N. Novaković, D. Rajnović, M. Šiljegović, Z. Kačarević Popović, S. Milovanović, N. Ivanović, *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 33, pp. 1876–1879, 2008;]. Iako je koncentracija stvorenih vakancija u površinskom sloju MgH₂ prilikom bombardovanja jonima bora dosta manja nego prilikom bombardovanja jonima ksenona i argona, ona je dovoljna da dovede do efekta snižavanja temperature desorpcije vodonika [Lj. Matović „Promena termijskih osobina MgH₂ usled destabilizacije strukture visokoenergetskim jonima,” *Doktorska disertacija, Univerzitet u Beogradu, 2010*;].

D. Naučni radovi i saopštenja iz oblasti teze

Iz oblasti teze Sandre Kurko publikovana su tri rada u vrhunskim naučnim časopisima međunarodnog značaja (M₂₁), tri rada u naučnim časopisima međunarodnog značaja (M₂₃), dva saopštenja sa međunarodnih naučnih skupova štampana u celini (M₃₃) i četiri saopštenja sa međunarodnih skupova koja su štampana u izvodu (M₃₄):

Radovi u vodećim časopisima međunarodnog značaja M₂₁

1. S. Kurko, I. Milanović, J. Grbović Novaković, N. Ivanović, N. Novaković,
Investigation of surface and near-surface effects on hydrogen desorption kinetics of MgH₂,
Int. J. Hydrogen Energy, 39 (2014) 862-867.
2. Lj. Matović, S. Kurko, Ž. Rašković-Lovre, R. Vujasin, I. Milanović, S. Milošević, J. Grbović Novaković,
Assessment of changes in desorption mechanism of MgH₂ after ion bombardment induced destabilization,
Int. J. Hydrogen Energy, 37 (2012) 6727-6732.
3. S. Kurko, Lj. Matović, N. Novaković, B. Matović, Z. Jovanović, B. Paskaš Mamula, J. Grbović Novaković,
Changes of Hydrogen Storage Properties of MgH₂ Induced by Boron Ion Irradiation,
Int. J. Hydrogen Energy, 36 (2011) 1184-1189.

Radovi u časopisima međunarodnog značaja M₂₃

1. J. Grbović Novaković, S. Kurko, Ž. Rašković-Lovre, S. Milošević, I. Milovanović, Z. Stojanović, R. Vujasin, Lj. Matović,
Changes in Storage Properties of Hydrides Induced by Ion Irradiation,
Mat. Science (MEDŽIAGOTYRA), 19 (2013) 134-139.
2. S. Kurko, B. Paskaš Mamula, Lj. Matović, J. Grbović Novaković, N. Novaković,

The influence of boron doping concentration on MgH₂ electronic structure,
Acta Phys. Pol. A, 120 (2011) 238-241.

3. **S. Kurko**, Lj. Matović, N. Novaković, S. Nenadović, Z. Jovanović, N. Ivanović, J. Grbović Novaković,
Ispitivanje promena desorpcionih osobina MgH₂ nastalih bombardovanjem jonskim snopovima,
Hem. Ind, 64 (2010) 227-232.

Radovi saopšteni na skupovima međunarodnog značaja štampani u celini M₃₃

1. J. Grbović Novaković, **S. Kurko**, Ž. Rašković-Lovre, S. Milošević, I. Milanović, R. Vujasin, Lj. Matović,
Changes in storage properties of hydrides induced by ion irradiation, in Proceedings of the 4th International Conference on Radiation interaction with material and its use in technologies 2012, Kaunas, Lithuania, 14-17. 05. 2012., pg. 28-31.
2. **S. Kumrić**, Lj. Matović, N. Novaković, M. Šiljegović, Z. Jovanović, Z. Kačarević Popović, J. Grbović Novaković,
Changes of Hydrogen Storage Properties of MgH₂ Induced by Boron Ion Irradiation, in Proceedings of the ICHMS'2009, XI International Conference on Hydrogen in Metal Yalta, Crimea, Ukraine, August 25-31. 2009. pp. 210-211.

Radovi saopšteni na međunarodnim naučnim skupovima štampani u izvodu M₃₄

1. **S. Kurko**, S. Milošević, I. Milanović, R. Vujasin, Lj. Matović, J. Grbović Novaković, N. Novaković,
Investigation of surface and near-surface effects on hydrogen desorption properties of MgH₂,
The joint event of The Eleventh Young Researchers' Conference Materials Science and Engineering and The First European Early Stage Researchers' Conference on Hydrogen Storage, Belgrade, 3-5 December, 2012, Book of abstracts, p.127.
2. **S. Kurko**, I. Milanović, J. Grbović Novaković, N. Novaković,
Role of Boron Doping on MgH₂ Hydrogen Surface Sorption Properties,
Hands-on Tutorial Workshop 2011 on ab initio Molecular Simulations, Towards a First-Principles Understanding of Materials Properties and Functions, Berlin, 12-22. July 2011, Book of abstracts, P31, p. 30.
3. **S. Kurko**, N. Novaković, Lj. Matović, Ž. Rašković, Z. Jovanović, B. Matović, J. Grbović Novaković,
MgH₂:B Nanocomposite for Hydrogen Storage: ab Initio Calculations and Experiment,
International Symposium "Metal-Hydrogen Systems. Fundamentals and Applications" Moscow, 19-23 July, 2010, Chemistry Department Lomonosov Moscow State University, Book of abstracts, p. 363.
4. **S. Kurko**, B. Paskaš Mamula, Lj. Matović, J. Grbović Novaković, N. Novaković,
The influence of boron doping concentration on MgH₂ electronic structure,

Annual Conference, YUCOMAT 2010, Herceg Novi, 6-10 September 2010, Book of abstracts, p. 120.

E. Zaključak komisije

Na osnovu izloženog može se zaključiti da rezultati kandidata predstavljaju originalan i značajan naučni doprinos ispitivanju materijala za skladištenje vodonika na bazi magnezijum hidrida. Delovi teze kandidata već su publikovani u vidu tri rada objavljena u vrhunskim naučnim časopisima međunarodnog značaja (M₂₁), tri rada u naučnim časopisima međunarodnog značaja (M₂₃), dva saopštenja sa međunarodnih naučnih skupova štampana u celini (M₃₃) i četiri saopštenja sa međunarodnih skupova koja su štampana u izvodu (M₃₄).

Na osnovu izloženog, Komisija predlaže Nastavno-naučnom veću Fakulteta za fizičku hemiju Univerziteta u Beogradu da rad Sandre Kurko pod naslovom „**Uticaj modifikacije strukture MgH₂ borom na proces dehidriranja**“, prihvati kao disertaciju za sticanje naučnog stepena doktora fizičko-hemijskih nauka i odobri njenu javnu odbranu.

Komisija:

Dr Slavko Mentus, redovni profesor, dopisni član SANU
Univerzitet u Beogradu- Fakultet za fizičku hemiju

Dr Jasmina Grbović Novaković, naučni savetnik
Univerzitet u Beogradu- Institut za nuklearne nauke „Vinča“

Dr Nikola Cvjetičanin, redovni profesor
Univerzitet u Beogradu- Fakultet za fizičku hemiju

Dr Igor Pašti, docent
Univerzitet u Beogradu- Fakultet za fizičku hemiju

Dr Nikola Novaković, naučni saradnik
Univerzitet u Beogradu- Institut za nuklearne nauke „Vinča“

Prilog: Bibliografija kandidata

Objavljeni naučni radovi i saopštenja

Radovi u vodećim časopisim međunarodnog značaja M₂₁

1. A. Đukić, K. Kumrić, N. Vukelić, M. Dimitrijević, Z. Baščarević, **S. Kurko**, Lj. Matović, **Simultaneous removal of Pb²⁺, Cu²⁺, Zn²⁺ and Cd²⁺ from highly acidic solutions using mechanochemically synthesized montmorillonite–kaolinite/TiO composite**, Applied Clay Science, 103 (2015) 20-27;
2. **S. Kurko**, I. Milanović, J. Grbović Novaković, N. Ivanović, N. Novaković, **Investigation of surface and near-surface effects on hydrogen desorption kinetics of MgH₂**, International Journal of Hydrogen Energy, 39(2) (2014) 862-867;
3. **S. Kurko**, A. Aurora, D. Mirabile Gattia, V. Contini, A. Montone, Ž. Rašković-Lovre, J. Grbović Novaković, **Hydrogen sorption properties of MgH₂/NaBH₄ composites**, International Journal of Hydrogen Energy, 38(27) (2013) 12140-12145;
4. **S. Kurko**, I. Milanović, S. Milolsević, Ž. Rašković-Lovre, J. F. Fernandez, J. R. Ares Fernandez, Lj. Matović, J. Grbović Novaković, **Changes in kinetic parameters of decomposition of MgH₂ destabilized by irradiation with C²⁺ ions**, International Journal of Hydrogen Energy, 38(27) (2013) 12199-12206;
5. S. Milošević, Ž. Rašković-Lovre, **S. Kurko**, R. Vujasin, N. Cvjetičanin, Lj. Matović, J. Grbović Novaković, **Influence of VO₂ nanostructured ceramics on hydrogen desorption properties from magnesium hydride**, Ceramics International, 39(1) (2013) 51-56;
6. Lj. Matović, **S. Kurko**, Ž. Rašković-Lovre, R. Vujasin, I. Milanović, S. Milošević, J. Grbović Novaković, **Assessment of changes in desorption mechanism of MgH₂ after ion bombardment induced destabilization**, International Journal of Hydrogen Energy, 37(8) (2012) 6727-6732;
7. S. Milošević, I. Stojković, **S. Kurko**, J. Grbović Novaković, N. Cvjetičanin, **The simple one-step solvothermal synthesis of nanostructured VO₂(B)**, Ceramics International 38 (3) (2012) 2313-2317;
8. J. Gulicovski, Ž. Rašković-Lovre, **S. Kurko**, R. Vujasin, Z. Jovanović, Lj. Matović, J. Grbović Novaković, **Influence of vacant CeO₂ nanostructured ceramics on MgH₂ hydrogen desorption properties**, Ceramics International 38 (2) (2012) 1181-1186;
9. **S. Kurko**, Ž. Rašković, N. Novaković, B. Paskaš Mamula, Z. Jovanović, Z. Baščarević, J. Grbović Novaković, Lj. Matović, **Hydrogen storage properties of MgH₂ mechanically milled with α and β SiC**, International Journal of Hydrogen Energy 36 (2011) 549-554;
10. **S. Kurko**, Lj. Matović, N. Novaković, B. Matović, Z. Jovanović, B. Paskaš Mamula, J. Grbović Novaković, **Changes of Hydrogen Storage Properties of MgH₂ Induced by Boron Ion Irradiation**, International Journal of Hydrogen Energy 36 (2011) 1184-1189;
11. Lj. Matović, N. Novaković, **S. Kurko**, M. Šiljegović, B. Matović, Z. Kačarević Popović, N. Romčević, N. Ivanović, J. Grbović Novaković, **Structural destabilisation of MgH₂ obtained by heavy ion irradiation**, International Journal of Hydrogen Energy, 34 (2009) 7275-7282;
12. D. Stojić, **S. Kumrić**, J. Belošević-Čavor, J. Radaković, B. Cekić, S. Mentus, **Hydridic, thermodynamic and kinetic properties of Hf₂Ni intermetallic phase**, International Journal of Hydrogen Energy, 34 (2009) 3764–3770;
13. D. Stojić, **S. Kumrić**, T. Grozdić, V. Koteski, B. Cekić, **Hydrogen production and storage—Investigation of Hf-based intermetallics**, Journal of Power Sources, 193 (2009) 165–169;

Radovi u časopisima međunarodnog značaja M₂₃

1. J. Grbović Novaković, **S. Kurko**, Ž. Rašković-Lovre, S. Milošević, I. Milanović, Z. Stojanović, R. Vujasin, Lj. Matović, **Changes in Storage Properties of Hydrides Induced by Ion Irradiation**, ISSN 1392–1320 Materials science (Medžiagotyra), 19 (2013) 134-139;
2. **S. Kurko**, Lj. Matović, R. Vujasin, I. Milanović, Ž. Rašković-Lovre, N. Ivanović, J. Grbović Novaković, **Aging Effects in Irradiated MgH₂; Connection to Hydrogen Production**, MATERIALS SCIENCE (MEDŽIAGOTYRA), 19 (2013) 349-353;
3. **S. Kurko**, B. Paskaš Mamula, Lj. Matović, J. Grbović Novaković, N. Novaković, **The influence of boron doping concentration on MgH₂ electronic structure**, Acta physica polonica A 120 (2011) 238-241;
4. **S. Kurko**, Lj. Matović, N. Novaković, S. Nenadović, Z. Jovanović, N. Ivanović, J. Grbović Novaković, **Ispitivanje promena desorpcionih osobina MgH₂ nastalih bombardovanjem jonskim snopovima**, Hemijska industrija, 64(3) 227-232 (2010);
5. **S. Kumrić**, D. Stojić, B. Cekić, **Ispitivanje kinetike hidriranja intermetalnih jedinjenja Hf₂Ni, Hf₂Co i Hf₂Fe**, Hemijska industrija, 63 (3) 159–162 (2009);

Radovi saopšteni na skupovima međunarodnog značaja štampani u celini M₃₃

1. J. Grbović Novaković, **S. Kurko**, Ž. Rašković-Lovre, S. Milošević, I. Milanović, R. Vujasin, Lj. Matović, **Changes in storage properties of hydrides induced by ion irradiation**, in Proceedings of 4th International Conference on radiation interaction with materials and its use in technologies 2012, Kaunas, Lithuania, 14-17. 05. 2012, p. 28;
2. S. Milošević, Ž. Rašković-Lovre, I. Milanović, **S. Kurko**, R. Vujasin, Z. Baščarević, Lj. Matović, J. Grbović Novaković, **Microstructure and hydrogen storage properties of MgH₂-TiB₂ composites**, in Proceedings of 10th Multinational Cogress of Microscopy, Urbino, Italy, 4-9. 09. 2011, p.495;
3. Ž. Rašković-Lovre, S. Milošević, I. Milanović, **S. Kurko**, R. Vujasin, Z. Baščarević, J. Grbović Novaković, Lj. Matović, **Microstructure and hydrogen storage properties of MgH₂-TiB₂-SiC composites**, in Proceedings of 10th Multinational Cogress of Microscopy, Urbino, Italy, 4-9. 09. 2011, p.507;
4. **S. Kumrić**, Lj. Matović, N. Novaković, M. Siljegović, Z. Jovanović, Z. Kačarević Popović, J. Grbović Novaković, **Changes of Hydrogen Storage Properties of MgH₂ Induced by Boron Ion Irradiation**, in Proceedings of the ICHMS'2009, XI International Conference on Hydrogen in Metal Yalta, Crimea, Ukraine, 25-31. 08. 2009. pp. 210-211;
5. **S. Kumrić**, S. Nenadović, M. Nenadović, R. Kovačević, Lj. Matović, B. Matović, J. Grbović Novaković, **Influence of Diatomite Microstructure on its adsorption capacity for Pb(II)**, in Proceedings of MC2009, First Joint Meeting of Dreilandertagung and Multinational Congress on Microscopy, 30. 08.- 04. 09. 2009, Graz, Austria, Vol. 3, pp 545-546;
6. T. Grozdić, D. Stojić, **S. Kumrić**, **Influence of external magnetic field on the electrolytic hydrogen evolution on different cathode materials**, in Proceedings of the 9th International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry, Belgrade, 24-26. 09. 2008 , Vol.1, pp. 276-278, E-5-P;

Radovi saopšteni na međunarodnim naučnim skupovima štampani u izvodu M₃₄

1. S. Milošević, N. Cvjetičanin, L.Pasquini, R. Vujasin, I. Milanović, **S.Kurko**, J. Grbović Novaković, **VO₂ (B) as anode material for aqueous Li-ion batteries and as a catalyst for hydrogen storage material MgH₂**, International symposium on Materials for Energy Storage & Conversion, Ankara , Turkey, 7-9. 9. 2015, The book of abstracts;

2. R. Vujasin, I. Milanović, **S. Kurko**, B. Paskaš Mamula, N. Novaković, **Possible paths of hydrogen diffusion in TiO₂—role of the surface**, Joint event of the 11th Young Researchers' Conference: Materials Science and Engineering and the 1st European Early Stage Researchers' Conference on Hydrogen Storage, Belgrade, Serbia, 3-5 12. 2012, p. 159;
3. Lj. Matović, **S. Kurko**, R. Vujasin, I. Milanović, Ž. Rašković-Lovre, S. Milošević, J. Grbović Novaković, **Changes in kinetic parameters of dehydration of MgH₂ destabilized by irradiation with C²⁺ ions**, Euro-mediterranean Hydrogen Technologies Conference 2012 (EMHyTeC 2012), Hammamet, Tunisia, 11-14. 9. 2012, p. 134-135;
4. **S. Kurko**, S. Milošević, I. Milanović, R. Vujasin, Lj. Matović, J. Grbović Novaković, N. Novaković, **Investigation of surface and near-surface effects on hydrogen desorption properties of MgH₂**, Joint event of the 11th Young Researchers' Conference: Materials Science and Engineering and the 1st European Early Stage Researchers' Conference on Hydrogen Storage, Belgrade, Serbia, 3-5 12. 2012, p. 127;
5. Ž. Rašković-Lovre, **S. Kurko**, N. Ivanović, J. Grbović Novaković, J. F. Fernández, J. R. Ares Fernández, C. Sánchez, N. Novaković, **Investigation of nucleation process in MgH₂ thin films**, The joint event of The Eleventh Young Researchers' Conference Materials Science and Engineering and The First European Early Stage Researchers' Conference on Hydrogen Storage Belgrade, 3-5 12. 2012, p.154;
6. **S. Kurko**, A. Aurora, D. Mirabile Gattia, V. Contini, A. Montone, Ž. Rašković-Lovre, J. Grbović Novaković, **Hydrogen sorption properties of MgH₂/NaBH₄ composites**, The joint event of The Eleventh Young Researchers' Conference Materials Science and Engineering and The First European Early Stage Researchers' Conference on Hydrogen Storage Belgrade, 3-5 12. 2012, p. 142;
7. I. Milanović, R. Vujasin, S. Milošević, Ž. Rašković-Lovre, **S. Kurko**, Lj. Matović, J. Grbović Novaković, **Mechanical synthesis of magnesium based nanocomposites**, Thirteenth Annual Conference YUCOMAT 2011, Herceg Novi, Montenegro 5-9. 9. 2011, , p. 150;
8. I. Milanović, R. Vujasin, S. Milošević, Ž. Rašković-Lovre, **S. Kurko**, Lj. Matović, J. Grbović Novaković, **Mechanochemical synthesis of MgH₂-TiB₂ composites for hydrogen storage**, VII International Conference on Mechanochemistry and Mechanical Alloying INCOME 2011, Herceg Novi, 31. 8.-3. 9. 2011, p. 57;
9. I. Milanović, R. Vujasin, S. Milošević, Ž. Rašković-Lovre, **S. Kurko**, Lj. Matović, J. Grbović Novaković, A. Aurora, A. Montone, **Mechanical milling of magnesium based composites for hydrogen storage**, VII International Conference on Mechanochemistry and Mechanical Alloying INCOME 2011, Herceg Novi, 31. 8.-3. 9. 2011, p. 76;
10. **S. Kurko**, I. Milanović, J. Grbović Novaković, N. Novaković, **Role of boron doping on MgH₂ hydrogen surface sorption properties**, Hands-on Tutorial Workshop 2011 on ab initio Molecular Simulations, Towards a First-Principles Understanding of Materials Properties and Functions, Berlin, 12-22. 7. 2011, Book of abstracts, P31, p. 30;
11. Ž. Rašković, **S. Kurko**, R. Vujasin, J. Gulicovski, S. Milošević, Lj. Matović, J. Grbović Novaković, **Hydrogen storage properties of MgH₂-CeO₂ composites**, Ninth Young Researchers Conference Materials Sciences and Engineering, Belgrade, Serbia, 20-22. 12. 2010, p. 33;
12. S. Milošević, Ž. Rašković, **S. Kurko**, Lj. Matović, N. Cvjetičanin, J. Grbović Novaković, **Hydrogen desorption from MgH₂-VO₂ composite**, Ninth Young Researchers Conference Materials Sciences and Engineering, Belgrade, Serbia, 20-22. 12. 2010, p. 33;
13. Ž. Rašković, **S. Kurko**, B. Paskaš Mamula, Lj. Matović, N. Novaković, R. Vujasin, J. Grbović Novaković, **Improvement of hydrogen storage properties of MgH₂ by α and β SiC**, The book of abstract of 1st Conference of the Serbian Ceramic Society, Belgrade, Serbia, 17-18. 03. 2011, p.60;

14. S. Milošević, Ž. Rašković, **S. Kurko**, Lj. Matović, N. Cvjetičanin, J. Grbović Novaković, **The influence of VO₂ on hydrogen desorption properties of MgH₂**, The book of abstract of 1st Conference of the Serbian Ceramic Society, Belgrade, Serbia, 17-18. 3. 2011, p.49;
15. **S. Kurko**, N. Novaković, Lj. Matović, Ž. Rašković, Z. Jovanović, B. Matović J. Grbović Novaković, **MgH₂:B Nanocomposite for Hydrogen Storage: ab Initio Calculations and Experiment**, International Symposium "Metal-Hydrogen Systems. Fundamentals and Applications" Moscow, Russia, 19-23. 7. 2010, Chemistry Department Lomonosov Moscow State University, Book of Abstracts p. 363;
16. Lj. Matović, **S. Kurko**, Ž. Rašković, B. Paskaš Mamula, Z. Baščarević, N. Novaković, J. Grbović Novaković, **Improvement of hydrogen storage properties of MgH₂ by α and β SiC**, 12th Annual Conference, YUCOMAT 2010, Herceg Novi, 6-10. 9. 2010, The Book of Abstracts, p. 114;
17. **S. Kurko**, B. Paskaš Mamula, Lj. Matović, J. Grbović Novaković, N. Novaković, **The influence of boron doping concentration on MgH₂ electronic structure**, Annual Conference, YUCOMAT 2010, Herceg Novi, September 6-10, 2010, The Book of Abstracts, p. 120;
18. Lj. Matović, S. Kurko, Ž. Rašković, N. Novaković, Z. Jovanović, J. Grbović Novaković, **Improvement of Hydrogen Storage Properties of MgH₂ by Formation of MgH₂-SiC Nanocomposite**. 11th Eurasia Conference on Chemical Sciences, Amman, Jemen, 6-11.October 2010 p. 132;
19. Lj. Matović, S. Kurko, Ž. Rašković, Z. Baščarević, N. Novaković, J. Grbović Novaković, **M21515-Improvement of Hydrogen Storage Properties of MgH₂-SiC Accepted abstract**, International conference of microscopy IMC 17, Rio de Jenairo, Brasil, 19-24. 9. 2010;
20. D. Stojić, **S. Kumrić**, T. Grozdić, M.Stojković, V. Koteski, **Hydrogen production and storage-Investigation of Hf-based intermetallics**, Fuel Cells Science and Technology 2008, Scientific Advances in Fuel Cell Systems. 8-9. 10. 2008, Copenhagen, Denmark **P.2.69**;

Radovi u časopisu od nacionalnog značaja M52

1. R. Vujsin, S. Milošević, **S. Kurko**, Ž. Rašković-Lovre, I. Milanović, A. Đukić, Lj. Matović, J. Grbović Novaković, **Hydrogen storage–Challenges of Today**, Tehnics Special issue 22 (2013) 7-15;
2. R. Vujsin, S. Milošević, **S. Kurko**, Ž. Rašković-Lovre, I. Milanović, A. Đukić, Lj. Matović, J. Grbović Novaković, **Načini skladištenja vodonika–izazovi današnjice**, Tehnika novi materijali 3 (2012) 335-344.

Učešće na projektima:

2008-2010. godine učestvovala je na projektu Ministarstva nauke i tehnološkog razvoja pod nazivom *Nanostrukturni neoksidni keramički i karbonski materijali i njihovi kompoziti*.

Od 2011. godine zaposlena je na projektu finansiranog od strane Ministarstva prosvete, nauke i tehnološkog razvoja Republike Srbije III 45012 pod nazivom *Sinteza, procesiranje i karakterizacija nanostrukturnih materijala za primenu u energetici i zaštiti životne sredine, inženjerstvu i biomeidicini* u okviru potprojekta *Eksperimentalna i teorijska istraživanja materijala za skladištenje vodonika*.

Učesnik COST akcije MP1103: *Nanostructured metal hydrides for solid state hydrogen storage*.

Takođe je bila učesnik međunarodnih bilateralnih projekata sa Italijom, Rusijom, Španijom i Slovenijom iz oblasti materijala za skladištenje vodonika.