NASTAVNO-NAUČNOM VEĆU
FAKULTETA ZA FIZIČKU HEMIJU

Na V redovnoj sednici Nastavno-naučnog veća Fakulteta za fizičku hemiju, održanoj **09.02.2017**. godine, imenovani smo u Komisiju za pregled i ocenu doktorske disertacije master fizikohemičara Radojke Vujasin, istraživača saradnika Instituta za nuklearne nauke „Vinča" Univerziteta u Beogradu, pod nazivom: **„Teorijsko i eksperimentalno istraživanje uticaja TiO_2 na sorpciju vodonika u MgH_2/Mg sistemu"**. Pošto smo pregledali doktorsku disertaciju podnosimo Nastavno-naučnom veću sledeći

IZVEŠTAJ

A. Prikaz sadržaja disertacije

Doktorska disertacija Radojke Vujasin napisana je na 102 strane kucanog teksta, i sadrži sledeća poglavlja: *Uvod* (17 strana), *Cilj rada* (2 strane), *Teorijsko-eksperimentalni deo* (32 strana), *Rezultati i diskusija* (42 strana), *Zaključak* (3 strane) i *Literatura* (128 referenci, 6 strana). Kandidat je uz tekst disertacije priložio i spisak radova proisteklih iz doktorske disertacije (2 strane), Biografiju (1 strana) i dodatke propisane pravilima Univerziteta o podnošenju doktorskih teza na odobravanje.

Rad sadrži ukupno 38 slika (5 slika iz postojeće literature, 33 slike predstavljaju vlastite rezultate) i 14 tabela od čega je 1 tabela sa podacima preuzetim iz dostupne naučne literature, a 13 predstavlja naučni doprinos kandidata.

U poglavlju *Uvod* prikazane su osnove vodonične energetike i opisani načini skladištenja vodonika, sa naglaskom na magnezijum hidrid (MgH_2) kao material pogodan za skladištenje vodonika. Predstavljeni su različiti načini destabilizacije kristalne strukture MgH_2 pri čemu je posebna pažnja posvećena mehaničkom mlevenju MgH_2 sa dodatkom 3d metala i njihovih oksida kao aditiva. Takođe su prezentovani do sada postignuti eksperimentalni rezultati modifikacije MgH_2 dodatkom aditiva (Ti, TiO_2, V, VO_2, CeO_2, Fe, Ni). Prikazana teorijska istraživanja MgH_2 razmatraju uticaj 3d metala i njihovih oksida na strukturu i stabilnost kristalne rešetke hidrida. Prezentovana su teorijska istraživanja međufazne granice MgH_2/Mg i katalitički uticaj metala na proces desorpcije vodonika.

Poglavlje *Teorijsko-eksperimentalni deo* podeljeno je na dve celine. U prvom delu su opisane osnove metode teorije funkcionala gustine naelektrisanja (DFT) i molekularne dinamike (MD) i dati su detalji proračuna. U drugom delu su predstavljene eksperimentalne metode koje su korišćene za sintezu i karakterizaciju uzoraka ispitivanih u ovom radu. Strukturna karakterizacija je urađena rendgenostrukturnom analizom (XRD), skenirajućom elektronskom mikroskopijom (SEM), transmisionom elektronskom mikroskopijom (TEM) i laserskom metodom za određivanje raspodele veličine čestica (PSD). Ispitivanje desorpcionih osobina materijala je izvršeno diferencijalnom termijskom analizom (DTA) i temperaturno programiranom desorpcijom (TPD). U poglavlju je takodje opisana metoda kinetičke analize dobijenih termodesorpcionih spektara pomoću softvera koji je napisan u okviru ove disertacije.

U poglavlju *Cilj rada* istaknuta je u kratkim crtama namera ove teze, a to je da se u eksperimentalnom delu teze ispita uticaj kristalne strukture TiO_2 kao aditiva na desorpcione karakteristike MgH_2. Tanki filmovi magnezijum hidrida prekriveni amorfnim tankim filmom titan dioksida su sintetisani sa ciljem lakšeg direktnog praćenja prolaska vodonika iz hidrida kroz međufaznu granicu MgH_2/TiO_2 i uticaja oksida na proces migracije vodonika. Takođe, cilj disertacije je i da se pomoću proračuna zasnovanih na teoriji funkcionala gustine ispita kakve efekte ima rutilni TiO_2 na proces dehidriranja magnezijum hidrida ako se kao aditiv nalazi na međufaznoj granici na različitim temperaturama i prati migracija vodonika kroz matricu TiO_2.

Poglavlje *Rezultati i diskusija* je podeljeno u četiri celine. U prvom delu su obrađeni rezultati simulacije difuzije vodonika kroz (110) površinu rutilnog TiO_2. Praćena je promena

strukture u zavisnosti od koncentracije vodonika kao i od mehanizma preraspodele naelektrisanja u sistemu. U drugom delu su prikazani rezultati ispitivanja uticaja Ti i TiO_2 na stabilnost i strukturu sistema MgH_2/Mg kao i na mobilnost vodonika u blizini međufazne granice hidrid-metal na različitim temperaturama. U trećem delu analizirana je desorpcija vodonika sa tankih filmova MgH_2 različite debljine koji su prekriveni slojem amorfnog TiO_2. Četvrti deo ovog poglavlja sadrži rezultate mikrostrukturne i morfološke karakterizacije MgH_2-TiO_2 nanokompozita kao i ocenu uticaja kristalne strukture TiO_2. Predstavljeni su i rezultati dobijeni ispitivanjem desorpcionih osobina ovog nanokompozita.

U poglavlju *Zaključak* su sumirani ključni rezultati istraživanja obuhvaćeni tezom.

B. Opis rezultata teze

U okviru ove doktorske disertacije teorijski i eksperimentalno je ispitan uticaj TiO_2 na desorpcione osobine MgH_2. Teorijsko ispitivanje interakcije najstabilnije (110) površine rutilnog TiO_2 i atoma H pokazuju da uvođenje atoma vodonika značajno menja matricu TiO_2, prouzrokujući velika pomeranja okolnih atoma usled elektrostatičke interakcije ogoljenog H atoma u kratkoj O-H vezi. Veličina ovog uticaja jako zavisi od koncentracije vodonika u sistemu. Izračunate su energije optimizovanih konfiguracija sa H atomom na različitom rastojanju od površine. Primećena je periodična zavisnost energije od rastojanja H atoma od površine koja pokazuje da atomski slojevi koji sadrže atome Ti i O i paralelni su površini deluju kao barijere za prolazak vodonika u dubinu materijala. Istovremeno, atomi H mogu relativno lako prelaziti sa jednog atoma O na drugi unutar oblasti osiromašenog naelektrisanja između dva atomska sloja. Pokazano je i da je uticaj površine ograničen na samo nekoliko atomskih slojeva najbližih vakuumu.

Simulacije ponašanja sistema međufazne granice MgH_2/Mg, na osnovu rada adhezije i energije formiranja MgH_2/Mg sistema, su pokazale da je formiranje defekata energijski povoljniji proces, s tim što je sistem dopiran sa TiO_2 stabilniji od sistema sa Ti kao dopantom. Takođe je pokazano da vrednosti rada adhezije opadaju sa rastojanjem oba dopanta od međufazne granice, dok je kod energija formiranja trend obrnut. Praćenje ponašanja vodonika na različitim temperaturama na osnovu srednjeg pomeraja atoma H u blizini međufazne granice hidrid/metal pokazuje da difuzija vodonika u sistemu dopiranom Ti počinje na 400 K, a u sistemu sa TiO_2 nema primetne difuzije vodonika čak i na višim temperaturama. Kiseonik u blizini Ti kao izrazitiji akceptor elektrona posredno utiče na skraćenje Ti-H veze, gde je H prvi sused Ti, i samim tim smanjuje mobilnost vodonika u blizini dopanta. Ovaj efekat je primećen u blizini MgH_2-Mg međufazne površine kao i u slojevima udaljenijim od spomenute površi. Zapreminski proračuni MgH_2 dopiranog sa Ti i TiO_2 govore da dopanti utiču na smanjenje mobilnosti vodonika u njihovoj blizini. Rezultati strukturne analize posle jonske relaksacije ne pokazuju značajnije razlike u koordinaciji Mg atoma za MgH_2/Mg sistem sa Ti i TiO_2 dopantima u sva tri položaja u odnosu na čist MgH_2. Mala razlika u koordinaciji atoma H je prisutna i to samo u prve dve ljuske, gde su svi atomi H iz druge ljuske prešli u prvu ljusku. Koordinacija H i Mg atoma na višim temperaturama daje različite rezultate u odnosu na one dobijene nakon optimizacije geometrije.

Tanki filmovi MgH_2 prekriveni tankim filmom amorfnog TiO_2 pokazuju znatno bolju kinetiku od čistog filma MgH_2. Prividna energija aktivacije je snižena tri puta: sa 319kJ/mol H_2 kod čistog filma na 112 kJ/mol H_2 kod filma čija je debljina 300 nm. Prekrivanje hidrida slojem amorfnog TiO_2 snižava temperaturu desorpcije za čak 60 stepeni, ali kinetika i način na koji dolazi do nukleacije zavise od debljine sloja MgH_2. Kod filma debljine 300 nm nukleacija metalne faze započinje na nehomogenostma kao što su su rupe i ogrebotine. Početak nukleacije kod filma od 200 nm veže se za postojanje čistog Mg u sistemu, što je potvrdjeno i većom temperaturom desorpcije, jer vodonik u tom slučaju mora da prevaziđe barijeru koju prouzrokuje međufazna granica MgH_2/Mg.

Sintetisani kompoziti MgH_2-TiO_2 sa istom koncetracijom anataza i rutila, i dva različita vremena mlevenja pokazuju da ovi polimorfi imaju različit uticaj na brzinu i temperaturu desorpcije. Potvrđeno je da su morfologija i mikrostruktura kompozita iste bez obzira na vreme

mlevenja, čime je isključen uticaj morfologije na temperaturu i kinetiku desoprcije. Pokazano je da se desorpcija odvija u tri stupnja. Mehanizam desorpcije i prividna energija aktivacije za desorpciju su ispitivani primenom izokonverzione metode analize DTA spektra. Dodatak rutilnog TiO_2 dovodi do smanjenja energije potrebne za desorpciju vodonika sa 139 kJ/mol H_2 za čist MgH_2 do 71 kJ/mol H_2 za 20 h mleven uzorak. Usled različitih procesa nukleacije ili promene dimenzionalnosti nukleusa došlo je i do promene mehanizma, od Avrami-Erofejevog n = 3 za čist prah MgH_2 do Avrami-Erofejevog n = 4 za uzorke kompozita. Zaključeno je da kristalna struktura aditiva igra presudnu ulogu u ubrzanju reakcije desorpcije jer je dodatak rutila pokazao katalitičku aktivnost, za razliku od anataza. Jedan od razloga bolje katalitičke aktivnosti rutilnog TiO_2 može biti činjenica da su parametri kristalnih rešetki rutila TiO_2 i MgH_2 jako slični.

C. Uporedna analiza rezultata teze sa rezultatima iz literature

U tezi je ispitivana difuzija vodonika kroz (110) površinu rutilnog TiO_2 i pokazano je da atomski slojevi sa atomima Ti i O paralelni površini deluju kao barijere za prolazak vodonika ka dubini materijala [**X. L. Yin, M. Calatayud, H. Qiu, Y. Wang, A. Birkner, C. Minot, C. Wöll, ChemPhysChem, vol. 9, pp. 253–256, 2008**] i da uticaj površine oseća samo nekoliko atomskih slojeva koji su joj najbliži, što se slaže sa podacima iz literature [**P. M. Kowalski, B. Meyer, D. Marx, Phys. Rev. B, vol. 79, p. 115410, 2009**].

Rezultati dobijeni za rad adhezije međufazne granice MgH_2/Mg su u saglasnosti sa literaturnim podacima [**S. Giusepponi, M. Celino, Crystals, vol. 2, pp. 845–860, 2012**]. Pokazano je da supstitucija jednog atoma Mg sa Ti u delu sistema sa MgH_2 daje uporedive vrednosti energije formiranja sa sistemom u kom je Mg supstituisan atomom Fe ili Ni [**S. Giusepponi, M. Celino, Int. J. Hydrogen Energy, vol. 38, pp. 15254–15263, 2013; S. Giusepponi, M. Celino, Int. J. Hydrogen Energy, vol. 40, pp. 9326-9334, 2015**]. Zapreminski proračuni MgH_2 dopiranog sa TiO_2 potvrđuju da atomi kiseonika utiču na jaču vezu Ti-H i smanjenje mobilnosti vodonika u blizini dopanta što se može uporediti sa već publikovanim rezultatima [**B. Paskaš Mamula, J. Grbović Novaković, I. Radisavljević, N. Ivanović, N. Novaković, Int. J. Hydrogen Energy, vol. 39, pp. 5874–5887, 2014**].

Analizom tankih filmova MgH_2 sa TiO_2 temperature na kojima dolazi do potpune desorpcije vodonika iz oba filma kao i dobijene prividne energije aktivacije slažu se sa literaturnim podacima za filmove MgH_2 prekrivene slojem Pd [**J. R. Ares, F. Leardini, P. Díaz-Chao, J. Bodega, D. W. Koon, I. J. Ferrer, J. F. Fernández, C. Sánchez, J. Alloys Compd., vol. 495, pp. 650–654, 2010, J. R. Ares, F. Leardini, P. Díaz-Chao, I. J. Ferrer, J. F. Fernández, C. Sánchez, Int. J. Hydrogen Energy, vol. 39, pp. 2587–2596, 2014**].

Pokazano je da se desorpcija vodonika kod sintetisanih kompozita MgH_2-TiO_2 odvija u tri stupnja što se slaže sa podacima iz literature [**F. Leardini, J. R. Ares, J. Bodega, J. F. Fernandez, I. J. Ferrer, C. Sanchez, Phys. Chem. Chem. Phys., vol. 12, pp. 572–577, 2010; I. Milanović, S. Milošević, Ž. Rašković-Lovre, N. Novaković, R. Vujasin, L. Matović, J. Francisco Fernández, C. Sánchez, J. Grbović Novaković, Ceram. Int., vol. 39, pp. 4399–4405, 2013**]. Čist mleven prah MgH_2 ima energiju desorpcije vodonika 139 kJ/mol H_2 koja se nakon dodatak rutilnog TiO_2 smanjuje na 71, tj. 97 kJ/mol H_2, za uzorak mleven 20 h, tj. 10 h. Dobijene energije aktivacije koje odgovaraju desorpciji vodonika su uporedive sa podacima dostupnim u literaturi [**R. A. Varin, T. Czujko, Z. S. Wronski, *Nanomaterials for solid state hydrogen storage*, Springer, New York, 2009; K. S. Jung, D. H. Kim, E. Y. Lee, K. S. Lee, Catal. Today, vol. 120, pp. 270–275, 2007; M. Polanski, J. Bystrzycki, J. Alloys Compd., vol. 486, pp. 697–701, 2009**].

D. Naučni radovi i saopštenja iz oblasti teze

Iz oblasti teze Radojke Vujasin publikovana su po jedan rad u međunarodnom časopisu izuzetnih vrednosti (M_{21a}) i vrhunskom međunarodnom časopisu (M_{21}), četiri saopštenja sa

međunarodnih naučnih skupova štampana u celini (M_{33}) i pet saopštenja sa međunarodnih skupova koja su štampana u izvodu (M_{34}):

Radovi u međunarodnim časopisima izuzetnih vrednosti M_{21a}

1. **Radojka Vujasin**, Jasmina Grbović Novaković, Nikola Novaković, Simone Giusepponi, Massimo Celino
   Ab-initio study of hydrogen mobility in the vicinity of MgH2-Mg interface: The role of Ti and TiO2
   J. Alloys Compd. 696 (2017) 548-559.

Radovi u vodećim časopisima međunarodnog značaja M_{21}

1. **R. Vujasin**, A. Mraković, S. Kurko, N. Novaković, Lj. Matović, J. Grbović Novaković, S. Milošević
   Catalytic activity of titania polymorphs towards desorption reaction of MgH_2
   Int. J. Hyd. Energy 41 (8) (2016) 4703-4711.

Radovi saopšteni na skupovima međunarodnog značaja štampani u celini M_{33}

1. **Radojka Vujasin**, Jasmina Grbović Novaković, Nikola Novaković, Simone Giusepponi, Massimo Celino
   The influence of TiO_2 and Ti dopants on the hydrogen mobility through MgH_2-Mg interface
   High performance computing on CRESCO infrastructure: research activities and results 2015, ISBN 978-88-8286-342-5.

2. **R. Vujasin**, S. Giusepponi, J. Grbović Novaković, N. Novaković, M. Celino
   Theoretical investigation of Mg-MgH_2 interface doped with Ti and TiO_2
   High performance computing on CRESCO infrastructure: research activities and results 2014, ISBN 978-88-8286-325-8.

3. **R. Vujasin**, J. Grbović Novaković, S. Giusepponi, N. Novaković
   Hydrogen diffusion in rutile TiO_2
   High performance computing on CRESCO infrastructure: research activities and results 2013, ISBN 978-88-8286-312-8.

4. **R. Vujasin**, B. Paskaš Mamula, I. Milanović, J. Grbović Novaković, N. Novaković
   Near-surface hydrogen dynamics in titania
   Physical chemistry 2014, 12th International conference on fundamental and applied aspects of physical chemistry, Belgrade, Serbia, 22.-26.09.2014, Proceedings pg. 745-748.

Radovi saopšteni na međunarodnim naučnim skupovima štampani u izvodu M_{34}

1. A. Mraković, S. Milošević, **R. Vujasin**, S. Mentus, S. Kurko, J. Grbović Novaković
   Desorption properties of MgH_2 -TiO_2 nanocomposites for hydrogen storage
   13th Young Researchers Conference – Materials Science and Engineering, Belgrade, Serbia December 10-12.2014, The book of abstracts pg. 17.

2. **R.Vujasin**, B. Paskaš Mamula, I. Milanović, J. Grbović Novaković, N. Novaković
   Hydrogen diffusion in surface area of TiO_2

1st Workshop on material science for Energy and Related Applications, Belgrade, Serbia 26-27.09.2014, The book of abstracts pg. 68-70.

3. **Radojka Vujasin**, Bojana Paskaš Mamula, Igor Milanović, Jasmina Grbović Novaković, Nikola Novaković
   Near-surface hydrogen diffusion in TiO_2
   EMRS 2013 Fall Meeting, Warsaw, Poland, 16-20 September 2013, pg. 68, C 5.

4. **Radojka Vujasin**, Igor Milanović, Sandra Kurko, Bojana Paskaš Mamula, Nikola Novaković
   Possible paths of hydrogen diffusion in TiO_2 – 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 December 2012, pg. 159.

5. **Radojka Vujasin**, Ljiljana Matović, Jasmina Grbović Novaković and Nikola Novaković
   Hydrogen - rutile TiO_2 (110) surface interaction
   Hands-on Tutorial Workshop 2011 on *ab initio* Molecular Simulations, Towards a First-Principles Understanding of Materials Properties and Functions 12-21.6.2011, The book of abstract pg. 45.

E. Zaključak komisije

Na osnovu izloženog može se zaključiti da rezultati kandidata predstavljaju originalan i značajan naučni doprinos ispitivanju materijala na bazi magnezijum hidrida za primenu u skladištenju vodonika. Delovi teze kandidata već su publikovani u vidu dva rada objavljena u naučnim časopisima međunarodnog značaja, jedan u časopisu izuzetnih vrednosti (M_{21a}) i drugi u vrhunskom međunarodnom časopisu (M_{21}), četiri saopštenja sa međunarodnih naučnih skupova štampana u celini (M_{33}) i pet saopštenja sa međunarodnih skupova koja su štampana u izvodu (M_{34}). U skladu sa tim Komisija smatra da kandidat ispunjava uslove za prihvatanje završene doktorske disertacije propisane od strane Univerziteta u Beogradu i uslove definisane Pravilnikom o izradi i oceni doktorske disertacije na Fakultetu za fizičku hemiju Univerziteta u Beogradu (Pravilnikom o izradi i oceni doktorske disertacije, član 9).

Na osnovu izloženog, Komisija predlaže Nastavno-naučnom veću Fakulteta za fizičku hemiju Univerziteta u Beogradu da rad Radojke Vujasin pod naslovom **„Teorijsko i eksperimentalno istraživanje uticaja TiO_2 na sorpciju vodonika u MgH_2/Mg sistemu“**, prihvati kao disertaciju za sticanje naučnog stepena doktora fizičkohemijskih nauka i odobri njenu javnu odbranu.

Komisija:

Dr Miljenko Perić, profesor emeritus, redovni član SANU
Univerzitet u Beogradu – Fakultet za Fizičku hemiju

_____

Dr Igor Pašti, vanredni profesor
Univerzitet u Beogradu – Fakultet za fizičku hemiju

_____

Dr Ivana Stojković Simatović, docent
Univerzitet u Beogradu – Fakultet za Fizičku hemiju

_____

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

_____

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

_____

Prilog: Bibliografija kandidata

Objavljeni naučni radovi i saopštenja

Radovi u međunarodnim časopisima izuzetnih vrednosti M_{21a}

1. **Radojka Vujasin**, Jasmina Grbović Novaković, Nikola Novaković, Simone Giusepponi, Massimo Celin, **Ab-initio study of hydrogen mobility in the vicinity of MgH_2-Mg interface: The role of Ti and TiO_2,** J. Alloys Compd. 696 (2017) 548-559
2. S. Milošević, S. Kurko, L. Pasquini, Lj. Matović, **R. Vujasin**, N. Novaković, J. Grbović Novaković, **Fast hydrogen sorption from MgH_2-VO_2(B) composite materials**, J Power Sources **307 (2016) 481-488**

Radovi u vodećim časopisim međunarodnog značaja M_{21}

1. **R. Vujasin**, A. Mraković, S. Kurko, N. Novaković, Lj. Matović, J. Grbović Novaković, S. Milošević, **Catalytic activity of titania polymorphs towards desorption reaction of MgH_2,** Int. J. Hyd. Energy 41 (8) (2016) 4703-4711
2. Igor Milanović, Sanja Milošević, Ljiljana Matović, **Radojka Vujasin**, Nikola Novaković, Riccardo Checchetto, Jasmina Grbović Novaković, **Hydrogen desorption properties of MgH_2/$LiAlH_4$ composites**, Int. J. Hyd. Energy 38(27) (2013) 12152-12158
3. Igor Milanović, Sanja Milošević, Željka Rašković-Lovre, Nikola Novaković, **Radojka Vujasin**, Ljiljana Matović, Jose Francisco Fernández, Carlos Sánchez, Jasmina Grbović Novaković, **Microstructure and hydrogen storage properties of MgH_2-TiB_2-SiC composites**, Ceramics International 39 (4) (2013) 4399-4405
4. Sanja Milošević, Željka Rašković-Lovre, Sandra Kurko, **Radojka Vujasin**, Nikola Cvjetićanin, Ljiljana Matović, Jasmina Grbović Novaković, **Influence of VO_2 nanostructured ceramics on hydrogen desorption properties from magnesium hydride**, Ceramics International 39 (1) (2013) 51-56
5. Ljiljana Matović, Sandra Kurko, Željka Rašković-Lovre, **Radojka Vujasin**, Igor Milanović, Sanja Milošević, Jasmina Grbović Novaković, **Assessment of changes in desorption mechanism of MgH_2 after ion bombardment induced destabilization**, Int. J. Hyd. Energy 37(8) (2012) 6727-6732
6. Jelena Gulicovski, Željka Rašković-Lovre, Sandra Kurko, **Radojka Vujasin**, Zoran Jovanović, Ljiljana Matović, Jasmina Grbović Novaković, **Influence of vacant CeO_2 nanostructured ceramics on MgH_2 hydrogen desorption properties**, Ceramics International 38 (2) (2012)1181-1186
7. **R. Vujasin**, M. Senćanski, J. Radić-Perić, M. Perić, **A Comparison of Various Variational Approaches for Solving the One-dimensional Vibrational Schrödinger Equation**, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. 63 (2010) 363-378

Radovi u časopisima međunarodnog značaja M_{23}

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 MgH_2; Connection to Hydrogen Production,** MATERIALS SCIENCE (MEDŽIAGOTYRA), 19 (2013) 349-353;

Radovi saopšteni na skupovima međunarodnog značaja štampani u celini M_{33}

1. Igor Milanović, Sanja Milošević, Ljiljana Matović, **Radojka Vujasin**, Nikola Novaković, Bojana Paskaš Mamula, Anđelka Đukić, Bojana Kuzmanović, Sandra Kurko, Riccardo Checchetto, Jasmina Grbović Novaković, **Nanostructured reactive hydrides for hydrogen storage**, Italian – Serbian cooperation on science, technology and humanities, ISBN 978-86-7522-048-0
2. **Radojka Vujasin**, Jasmina Grbović Novaković, Nikola Novaković, Simone Giusepponi, Massimo Celino, **The influence of TiO_2 and Ti dopants on the hydrogen mobility through MgH_2-Mg interface**, High performance computing on CRESCO infrastructure: research activities and results 2015, ISBN 978-88-8286-342-5
3. N. Novaković, **R. Vujasin**, B. Paskaš Mamula, J. Grbović Novaković, **Metal Doped Rutile TiO_2 as Electrode in DSSC**, High performance computing on CRESCO insfrastructure: research activities and results 2014, ISBN 978-88-8286-325-8
4. **R. Vujasin**, S. Giusepponi, J. Grbović Novaković, N. Novaković, M. Celino, **Theoretical investigation of Mg-MgH_2 interface doped with Ti and TiO_2**, High performance computing on CRESCO insfrastructure: research activities and results 2014, ISBN 978-88-8286-325-8
5. **Radojka Vujasin**, Jasmina Grbović Novaković, Nikola Novaković, Simone Giusepponi, Massimo Celino, Amelia Montone, **Benchmark of the CPMD code on the CRESCO clusters in ENEAGRID environment**, High performance computing on CRESCO insfrastructure: research activities and results 2013, ISBN 978-88-8286-312-8
6. **R. Vujasin**, J. Grbović Novaković, S. Giusepponi, N. Novaković, **Hydrogen diffusion in rutile TiO_2**, High performance computing on CRESCO insfrastructure: research activities and results 2013, ISBN 978-88-8286-312-8
7. **R. Vujasin**, B. Paskaš Mamula, I. Milanović, J. Grbović Novaković, N. Novaković, **Near-surface hydrogen dynamics in titania**, Physical chemistry 2014, 12th International conference on fundamental and applied aspects of physical chemistry, Belgrade, Serbia, 22.-26.09.2014, Proceedings pg. 745-748
8. S. Kurko, **R. Vujasin**, A. Đukić, B. Paskaš Mamula, J. Grbović Novaković, N. Novaković, **Hydrogen desorption from vacant MgH_2**, Physical chemistry 2014, 12th International conference on fundamental and applied aspects of physical chemistry, Belgrade, Serbia, 22.-26.09.2014, Proceedings pg. 695-698
9. S. Milošević, **R. Vujasin**, Lj. Matović, Ž. Rašković-Lovre, J. Grbović Novaković, **Remarkable sorption properties of MgH_2-VO_2 nanocomposites**, Physical chemistry 2014, 12th International conference on fundamental and applied aspects of physical chemistry, Belgrade, Serbia, 22.-26.09.2014, Proceedings pg. 691-694
10. 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**, 4th International Conference on radiation interaction with materials and its use in technologies 2012, Kaunas, Lithuania, 14-17.05.2012, pg. 28
11. Ž. Raškovic-Lovre, S.Miloševic, I. Milanovic, S. Kurko, **R. Vujasin**, Z. Bašcarevic, J. Grbovic Novakovic, Lj. Matovic, **Microstructure and hydrogen storage properties of MgH_2-TiB_2-SiC composites**, Proceedings of 10th Multinational Cogress of Microscopy, Urbino 4-9.09.2011, Italy, pg.507
12. S. Miloševic, Ž. Raškovic-Lovre, I. Milanovic, S. Kurko, **R. Vujasin**, Z. Bašcarevic,

Lj. Matovic, J. Grbovic Novakovic, **Microstructure and hydrogen storage properties of MgH_2-TiB_2 composites**, Proceedings of 10th Multinational Cogress of Microscopy, Urbino 4-9.09.2011, Italy, pg.495

Radovi saopšteni na međunarodnim naučnim skupovima štampani u izvodu M_{34}

1. **Radojka Vujasin**, Simone Giusepponi, Massimo Celino, Jasmina Grbović Novaković, Nikola Novaković, **Impact of TiO_2 on hydrogen sorption behaviuor in Mg-MgH_2** system, Workshop of French, Croatian and Serbian Researchers on Hydrogen Storage and Energy Related Materials, Belgrade, 18-19.10.2016. pg 19
2. Sandra Kurko, Sanja Milošević, Igor Milanović, Nikola Novaković, **Radojka Vujasin**, Jasmina Grbović Novaković, **Influence of light ion irradiation on MgH_2 dehydrogenation**, Workshop of French, Croatian and Serbian Researchers on Hydrogen Storage and Energy Related Materials, Belgrade, 18-19.10.2016. pg 14
3. Igor Milanović, Sanja Milošević, Sandra Kurko, Milijana Savić, **Radojka Vujasin**, Anđelka Đukić, Jasmina Grbović Novaković, **Hydrogen desorption properties of $LiAlH_4$ – Fe_2O_3 composite**, Workshop of French, Croatian and Serbian Researchers on Hydrogen Storage and Energy Related Materials, Belgrade, 18-19.10.2016. pg 16
4. **R.Vujasin**, B. Paskaš Mamula, I. Milanović, J. Grbović Novaković, N. Novaković, **Hydrogen diffusion in surface area of TiO_2**, 2nd International Meeting on materials Science for Energy Related Applications, Belgrade, Serbia 29-30.09.2016, Book of abstracts pg. 44
5. Lj. Matović, A. Đukić, **R. Vujasin**, S. Milošević, S. Kurko, J. Grbović Novaković, **Hydrogen storage as limiting step toqards mobile (on board) application**, NANOTEC2016, Valencia, Spain, September 26-27.2016, The book of abstract pp. 99
6. Ljiljana Lj Matović, Ksenija R Kumrić, Igor V Milanović, **Radojka T Vujasin**, Anđelka B Đukić, **Mechanochemically improved surface properties of activated carbon cloth for removal As(V) from water**, 2nd International Conference and Expo on Separation Techniques, Valencia, Spain, September 26-28.2016, The book of abstract pp. 94.
7. S. Milošević, N. Cvjetićanin, L. Pasquini, **R. Vujasin**, I. Milanović, S. Kurko, J. Grbović Novaković, **VO_2 (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 07-09.09.2015, The book of abstracts.
8. S. Milošević, **R. Vujasin**, I. Milanović, M. Lelis, D. Milčius, R. Zostautiene, J.R. Ares Fernandez, F. Leardini, C. Sanchez, J. Grbović Novaković, **In situ desorption of MgH_2-TiO_2 thin films**, 9th Int. Symposium Hydrogen & Energy, Emmetten, Switzerland, January 25-30.2015, The book of abstracts pg. 35.
9. A. Mraković, S. Milošević, **R. Vujasin**, S. Mentus, S. Kurko, J. Grbović Novaković, **Desorption properties of MgH_2 -TiO_2 nanocomposites for hydrogen storage**, 13th Young Researchers Conference – Materials Science and Engineering, Belgrade, Serbia December 10-12.2014, The book of abstracts pg. 17
10. **R.Vujasin**, B. Paskaš Mamula, I. Milanović, J. Grbović Novaković, N. Novaković, **Hydrogen diffusion in surface area of TiO_2**, 1st Workshop on material science for Energy and Related Applications, Belgrade, Serbia 26-27.09.2014, The book of abstracts pg. 68-70
11. S. Milošević, **R. Vujasin**, S. Kumrić, Lj. Matović, Ž. Rašković-Lovre, L. Pasquini, J. Grbović Novaković, **Enhanced hydrogen sorption properties of MgH_2 catalyzed with VO_2**, 1st Workshop on material science for Energy and Related Applications, Belgrade, Serbia, 26-27.09.2014, The book of abstracts pg. 64-67

12. S. Kurko, **R. Vujasin**, Lj. Matović, A. Đukić, B. Paskaš Mamula, J. Grbović Novaković, N. Novaković, **Effects of vacancies on hydrogen deseorption properties of MgH_2,** 1st Workshop on material science for Energy and Related Applications, Belgrade, Serbia, 26-27.09.2014, The book of abstracts pg. 61-64
13. I. Milanović, **R. Vujasin**, Lj. Matović, A. Đukić, B. Paskaš Mamula, J. Grbović Novaković, N. Novaković, H**ydrogen sorption properties of MgH_2 based hydrides doped with SiC, TiB_2 and $LiALH_4$,** 1st Workshop on material science for Energy and Related Applications, Belgrade, Serbia, 26-27.09.2014, The book of abstracts pg. 58-61
14. **Radojka Vujasin**, Bojana Paskaš Mamula, Igor Milanović, Jasmina Grbović Novaković, Nikola Novaković, **Near-surface hydrogen diffusion in TiO_2,** EMRS 2013 Fall Meeting, Warsaw, Poland, 16-20 September 2013, pg. 68, C 5.
15. A. Đukić, J. Grbović Novaković,Z. Stojanović, I. Milanović, R. Vujasin, S. Milošević, Lj. Matović, **Surface characterization of mechanochemicaly activated carbon cloth**, 13th Annual Conference YUCOMAT 2013, Herceg Novi, Montenegro, September 2–6, 2013 Programme and The Book of Abstracts pg.126
16. **Radojka Vujasin**, Igor Milanović, Sandra Kurko, Bojana Paskaš Mamula, Nikola Novaković, **Possible paths of hydrogen diffusion in TiO_2 – 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 December 2012, pg. 159
17. Igor Milanović, Sanja Milošević, Ljiljana Matović, **Radojka Vujasin**, Nikola Novaković, Riccardo Checchetto, Jasmina Grbović Novaković, **Hydrogen desorption properties of MgH_2/$LiAlH_4$ composites**, 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 December 2012, pg. 150
18. Sandra Kurko, Sanja Milošević, Igor Milanović, **Radojka Vujasin**, Ljiljana Matović, Jasmina Grbović Novaković, Nikola Novaković, **Investigation of surface and near-surface effects on hydrogen desorption properties of MgH_2,** 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 December 2012, pg. 127
19. S. Milošević, Ž. Rašković-Lovre, I. Milanović, A. Đukić, **R. Vujasin**, Lj. Matović, J. Grbović Novaković, **Kinetic investigation of hydrogen storage properties of MgH_2-TiB_2 composite**, Euro-mediterranean Hydrogen Technologies Conference 2012 (EMHyTeC 2012), Hammamet, Tunisia, 11-14 Septembar 2012, pg. 153-155
20. Lj. Matović, S. Kurko, **R. Vujasin**, I. Milanović, Ž. Rašković-Lovre, S. Milošević, J. Grbović Novaković, **Changes in kinetic parameters of dehydration of MgH_2 destabilized by irradiation with C^{2+} ions**, Euro-mediterranean Hydrogen Technologies Conference 2012 (EMHyTeC 2012), Hammamet, Tunisia, 11-14 Septembar 2012, pg. 134-135
21. 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, September 5-9, 2011, Montenegro, pg. 150

22. I. Milanović, **R. Vujasin**, S. Milošević, Ž. Rašković-Lovre, S. Kurko, Lj. Matović, J. Grbović Novaković, **Mechanochemical synthesis of MgH_2-TiB_2 composites for hydrogen storage**, VII International Conference on Mechanochemistry and Mechanical Alloying INCOME 2011, Herceg Novi, August 31-September 3, 2011, pg. 57
23. I. Milanović, **R. Vujasin**, S. Milošević, Ž. Rašković, 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, August 31-September 3, 2011, pg. 76
24. **Radojka Vujasin**, Ljiljana Matović, Jasmina Grbović Novaković and Nikola Novaković, **Hydrogen - rutile TiO_2 (110) surface interaction**, Hands-on Tutorial Workshop 2011 on *ab initio* Molecular Simulations, Towards a First-Principles Understanding of Materials Properties and Functions 12-21.6.2011, The book of abstract pg. 45
25. **Radojka Vujasin**, Milan Senćanski, Miljenko Perić, **Theoretical investigation of the structure of the BC_2**, The book of abstract of 1st Conference of the Serbian Ceramic Society, Belgrade, Serbia, 17-18.03.2011 pg.70
26. Željka Rašković, Sandra Kurko, Bojana Paskaš Mamula, Ljiljana Matović, Nikola Novaković, **Radojka Vujasin** and Jasmina Grbović Novaković, **Improvement of hydrogen storage properties of MgH_2 by α and β –SiC**, The book of abstract of 1st Conference of the Serbian Ceramic Society, Belgrade, Serbia, 17-18.03.2011 pg.60
27. **Radojka Vujasin**, Milan Senćanski, **Ab initio calculation of the structure and partition functions of BC_2**, Ninth Young Researchers Conference Materials Sciences and Engineering December 20-22, 2010, Belgrade, Serbia, pg. 26.
28. Željka Rašković, Sandra Kurko, **Radojka Vujasin**, Jelena Gulicovski, Sanja Milošević, Ljiljana Matović, Jasmina Grbović Novaković, **Hydrogen storage properties of MgH_2-CeO_2 composites**, Ninth Young Researchers Conference Materials Sciences and Engineering December 20-22, 2010, Belgrade, Serbia, pg. 33

Radovi u časopisu od nacionalnog značaja M_{52}

1. Anđelka B. Đukić, Nikola S. Vukelić, Bojana M. Paskaš Mamula, Nikola B. Novaković, **Radojka T. Vujasin**, Sanja S. Milošević, Ljiljana Lj. Matović **„Određivanje površinskih grupa Boemovom metodom na mehanohemijski modifikovanoj ugljeničnoj tkanini“,** Tehnika - Novi materijali 23(3) (2014) 367-372.
2. **R. Vujasin**, 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;
3. **R. Vujasin**, S. Milošević, S. Kurko, Ž. Rašković-Lovre, I. Milanović, A. Đukić, Lj. Matović, J. Grbović Novaković, **Načini skladištenja vodonika–izazovi današnjice**,Tehika novi materijali 3 (2012) 335-344.

Učešće na projektima:

Od 2011. godine zaposlena je na projektu finansiranom 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 biomedicini“ u okviru potprojekta „Eksperimentalna i teorijska istraživanja materijala za skladištenje vodonika“.

Učestvovala je u COST akciji MP1103 (2011-2015): „*Nanostructured materials for solid-state hydrogen storage"*, i međunarodnim projektima HPC Europa: „*Investigation of TiO_2 surface and MgH_2-TiO_2 interface hydrogen dynamic*" i SOPHIA: „*Metal Doped Rutile TiO_2 as electrode in DSSC – MD-Rut-DSSC*".

Bila je ili je i dalje učesnik bilateralnih projekata iz oblasti materijala za skladištenje vodonika:

- Španija – Srbija (2010-2012): „Efekat jonskog bombardovanja na katalitičke osobine jedinjenja na bazi magnezijuma",
- Slovenija – Srbija (2012-2013): „Ispitivanje mikrostrukture materijala za skladištenje vodonika i korelacija sa desorpcionim osobinama",
- Italija – Srbija (2013-2015): „Nanostrukturni reaktivni hidridni kompoziti za skladištenje vodonika"
- Francuska – Srbija (2016-2017): „Nanostrukturni kompozitni materijali za skladištenje vodonoka u čvrstom stanju"
- Hrvatska – Srbija (2016-2017): „Amonijum boran i njegovi derivati sa skladištenje vodonika u čvrstom stanju".