

НАСТАВНО-НАУЧНОМ ВЕЋУ ФАКУЛТЕТА ЗА ФИЗИЧКУ ХЕМИЈУ

На VII редовној седници Наставно-научног већа Факултета за физичку хемију Универзитета у Београду, одржаној 12. априла 2018. године, одређени смо за чланове Комисије ради спровођења поступка за стицање научног звања **научни сарадник др Ане Доброте**.

На основу приложене и прикупљене документације о кандидату, биографских података и прегледа научно-истраживачког рада, а у складу са Законом о научно-истраживачкој делатности и Статутом Факултета за физичку хемију подносимо следећи:

ИЗВЕШТАЈ

А. Општи подаци о кандидату

Ана С. Доброта рођена је 16. јуна 1990. године у Вараждину. Основну школу завршила је 2005. године, а средњу школу 2009. године.

Основне академске студије Факултета за физичку хемију Универзитета у Београду уписала је 2009., а завршила 2013. године, са просечном оценом 9,89, одбраном дипломског рада „Теоријска студија површина Ni_xMo_{1-x} “.

Школовање на истом факултету наставила је кроз мастер академске студије физичке хемије 2013. године, а завршила их је 2014. године са просечном оценом 10, одбраном мастер рада „Теоријска анализа адсорпције Н, О и ОН на графен-оксиду“.

Докторске академске студије Факултета за физичку хемију Универзитета у Београду уписала је 2014. године. Докторску дисертацију „Теоријска анализа функционализације графена за примене у конверзији и складиштењу енергије“, чији је ментор био др Игор Пашти, ванредни професор Факултета за физичку хемију, одбранила је 25. децембра 2017. године.

Од 2015. године запослена је као истраживач-приправник на Факултету за физичку хемију, на пројекту Министарства образовања, науке и технолошког развоја Републике Србије „Литијум јон батерије и горивне ћелије – истраживање и развој“, бр. ИИИ45014, чији је руководилац проф. др Славко Ментус, редовни члан САНУ, као и на међународним пројектима DURAPEM - Novel materials for durable proton exchange membrane fuel cells“.

NATO Emerging Security Challenges Division (SPS Programme), DANUBE REGION пројекат „Композити проводних полимера“ и „Modelling of complex materials“ (Swedish National Infrastructure for Computing, број 2016/34-32).

Од 2016. године запослена је и као асистент за област физичка хемија на Факултету за физичку хемију. Учествује у реализацији наставе на предметима Електрохемија, Атомистика, Практикум из математике за физикохемичаре и Физичка хемија 1 за студенте Хемијског факултета (основне академске студије - студијски програм Хемија и интегрисане основне и дипломске академске студије - студијски програм Настава хемије). Осим на Факултету за физичку хемију, била је ангажована и као асистент за предмет Физичка хемија на Пољопривредном факултету Универзитета у Београду.

Током основних и мастер студија била је стипендиста Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије, града Београда и Фонда за младе таленте Републике Србије. За одличан успех током основних студија награђена је дипломом Павле Савић Друштва физикохемичара Србије, као и специјалном повељом Српског хемијског друштва. Носилац је и награде фондације Сестре Булајић за најбољи дипломски рад из области физичке хемије, као и Пупинове награде Матице српске за најбољи мастер рад. Током 2015. године провела је месец дана на КТН – Royal Institute of Technology (Стокхолм, Шведска) у оквиру студијске посете групи чији је руководилац проф. др Наталија Скородумова.

Аутор је четрнаест радова објављених у научним часописима, као и петнаест саопштења са међународних конференција. Редовни је учесник конференција младих истраживача. Бави се и популаризацијом науке кроз различите манифестације, као редовни учесник манифестација „Фестивал науке“, „Ноћ истраживача“, као и „Наука око нас“ коју организује Факултет за физичку хемију..

Б. Библиографија

1. Магистарске и докторске тезе

1.1. Одбрањена докторска дисертација (М70)

***1 × 6 = 6**

„Теоријска анализа функционализације графена за примене у конверзији и складиштењу енергије“, Факултет за физичку хемију, Универзитет у Београду, Београд, 2017.

2. Радови објављени у научним часописима међународног значаја

2.1. Радови у међународним часописима изузетних вредности (M21a):

$$*1 \times 10/(1+0,2(6-5)) = 8,33$$

2.1.1. I.A. Pašti, A. Jovanović, **A.S. Dobrota**, S.V. Mentus, B. Johansson, N.V. Skorodumova. Atomic adsorption on pristine graphene along the Periodic Table of Elements–From PBE to non-local functionals. *Appl. Surf. Sci.* 436 (2018) 433-440.

2.2. Рад у врхунском међународном часопису (M21):

$$*2 \times 8/(1+0,2(6-5)) + 7 \times 8 = 69,33$$

2.2.1. I.A. Pašti, A. Jovanović, **A.S. Dobrota**, S.V. Mentus, B. Johansson, N.V. Skorodumova. Atomic adsorption on graphene with a single vacancy: systematic DFT study through the periodic table of elements. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 20(2) (2018) 858-65. **8/(1+0,2(6-5)) поена**

2.2.2. E. Fako, **A.S. Dobrota**, I.A. Pašti, N. López, S.V. Mentus, N.V. Skorodumova. Lattice mismatch as the descriptor of segregation, stability and reactivity of supported thin catalyst films. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 20(3) (2018) 1524-1530. **8/(1+0,2(6-5)) поена**

2.2.3. S.J. Gutić, A.Z. Jovanović, **A.S. Dobrota**, D. Metarapi, L.D. Rafailović, I.A. Pašti, S.V. Mentus. Simple routes for the improvement of hydrogen evolution activity of Ni-Mo catalysts: From sol-gel derived powder catalysts to graphene supported co-electrodeposits. *Int. J. Hydrogen Energy* (2017) DOI: 10.1016/j.ijhydene.2017.11.131. **8 поена**

2.2.4. **A.S. Dobrota**, I.A. Pašti, S.V. Mentus, B. Johansson, N.V. Skorodumova. Functionalized graphene for sodium battery applications: the DFT insights. *Electrochim. Acta* 250 (2017): 185-195. **8 поена**

2.2.5. **A.S. Dobrota**, I.A. Pašti, S.V. Mentus, N.V. Skorodumova. A DFT study of the interplay between dopants and oxygen functional groups over the graphene basal plane – implications in energy-related applications. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 19(12) (2017): 8530-8540. **8 поена**

2.2.6. S.J. Gutić, **A.S. Dobrota**, M. Leetmaa, N.V. Skorodumova, S.V. Mentus, I.A. Pašti. Improved catalysts for hydrogen evolution reaction in alkaline solutions through the electrochemical formation of nickel-reduced graphene oxide interface. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 19(20) (2017) 13281-13293. **8 поена**

2.2.7. **A.S. Dobrota**, I.A. Pašti, S.V. Mentus, N.V. Skorodumova. A general view on the reactivity of the oxygen-functionalized graphene basal plane. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 18(9) (2016) 6580-6586. **8 поена**

2.2.8. D. Chanda, J. Hnát, **A.S. Dobrota**, I.A. Pašti, M. Paidar, K. Bouzek. The effect of surface modification by reduced graphene oxide on the electrocatalytic activity of nickel towards the hydrogen evolution reaction. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 17(40) (2015) 26864-26874. **8 поена**

2.2.9. **A.S. Dobrota**, I.A. Pašti, N.V. Skorodumova. Oxidized graphene as an electrode material for rechargeable metal-ion batteries—a DFT point of view. *Electrochim. Acta* 176 (2015) 1092-1099. **8 поена**

2.3. Рад у истакнутом међународном часопису (M22):

$$*1 \times 5 + 1 \times 5/(1+0,2(10-7)) = 5,125$$

2.3.1. **A.S. Dobrota**, S. Gutić, A. Kalijadis, M. Baljzović, S.V. Mentus, N.V. Skorodumova, I.A. Pašti. Stabilization of alkali metal ions interaction with OH-functionalized graphene via clustering of OH groups – implications in charge storage applications. *RSC Adv.* 6(63) (2016) 57910-57919. **5 поена**

2.3.2. I.A. Pašti, N.M. Gavrilov, **A.S. Dobrota**, M. Momčilović, M. Stojmenović, A. Topalov, D.M. Stanković, B. Babić, G. Ćirić-Marjanović, S.V. Mentus. The effects of a low-level boron, phosphorus, and nitrogen doping on the oxygen reduction activity of ordered mesoporous carbons. *Electrocatalysis* 6(6) (2015) 498-511. **5/(1+0,2(10-7)) поена**

2.4. Радови у међународном часопису (M23):

$$*1 \times 3 = 3$$

2.4.1. S. Gutić, **A.S. Dobrota**, N. Gavrilov, M. Baljzović, I.A. Pašti, S.V. Mentus. Surface charge storage properties of selected graphene samples in pH-neutral aqueous solutions of alkali metal chlorides-particularities and universalities. *Int. J. Electrochem. Sci.* 11 (2016) 8662-8682. **3 поена**

3. Зборници са међународних научних скупова

3.1. Саопштење са међународног скупа штампано у целини (M33)

$$*1 \times 1/(1+0,2(6-5)) = 0,83$$

3.1.1. I.A. Pašti, **A.S. Dobrota**, N.M. Gavrilov, S. Gutić, N.V. Skorodumova, S.V. Mentus, “First principles insights in graphene functionalization for energy conversion applications“, Physical Chemistry 2016: Proceedings, Vol. 1 (2016) 29, ISBN 978-86-82475-34-7, Belgrade, Serbia.

3.2. Саопштење са међународног скупа штампано у изводу (M34):

$$*13 \times 0,5 + 1 \times 0,5/(1+0,2(6-5)) = 6,92$$

3.2.1. **Ana S. Dobrota**, Igor A. Pašti, Nitrogen-doped graphene nanoribbons for oxygen reduction reduction - DFT insights, Sixteenth Young Researchers' Conference - Materials Science and Engineering: Program and the Book of Abstracts, Institute of Technical Sciences of SASA (2017) 27, ISBN: 978-86-80321-33-2, Belgrade, Serbia. **0,5 поена**

- 3.2.2. Nataša P. Diklić, **Ana S. Dobrota**, Igor A. Pašti, First principles insights in sodium storage by B- and N-doped epoxy-graphene, Sixteenth Young Researchers' Conference - Materials Science and Engineering: Program and the Book of Abstracts, Institute of Technical Sciences of SASA (2017) 28, ISBN: 978-86-80321-33-2, Belgrade, Serbia. **0,5 поена**
- 3.2.3. A.Z. Jovanović, **A.S. Dobrota**, L.D. Rafailović, S.V. Mentus, N.V. Skorodumova, I.A. Pašti, Theoretical investigation of V₂O₅ doping by transitional metals for energy storage applications, HYCELTEC 2017, 6th Symposium on Hydrogen, Fuel Cells and Advanced Batteries (2017) Porto, Portugal. **0,5/(1+0,2(6-5)) поена**
- 3.2.4. A.Z. Jovanović, S.J. Gutić, **A.S. Dobrota**, L.D. Rafailović, S.V. Mentus, I.A. Pašti, Nickel-Molybdenum electrocatalysts for hydrogen production - From alloy powders to complex Ni-Mo@rGO interfaces, HYCELTEC 2017, 6th Symposium on Hydrogen, Fuel Cells and Advanced Batteries (2017) Porto, Portugal. **0,5 поена**
- 3.2.5. S.J. Gutić, I.A. Pašti, **A.S. Dobrota**, F. Korać, D. Metarapi, N. Oprašić, Promotion effects of reduced graphene oxide on catalytic properties of nickel towards the hydrogen evolution, 6th Regional Symposium on Electrochemistry - South-East Europe, Book of Abstracts (2017) 63, Balatonkenese, Hungary. **0,5 поена**
- 3.2.6. **A.S. Dobrota**, I.A. Pašti, N.V. Skorodumova, S.V. Mentus, Graphene-based materials for metal-ion batteries, GRAPHSENS, Graphene-based components and flexible electronic/sensing devices (2017) Novi Sad, Serbia. **0,5 поена**
- 3.2.7. **A.S. Dobrota**, S. Gutić, I.A. Pašti, N.V. Skorodumova, Clustering of OH groups on graphene for enhanced charge storage, Fifteenth Young Researchers' Conference - Materials Sciences and Engineering: Program and the Book of Abstracts, Institute of Technical Sciences of SASA (2016) 25, ISBN: 978-86-80321-32-5, Belgrade, Serbia. **0,5 поена**
- 3.2.8. S. Gutić, **A.S. Dobrota**, A. Kalijadis, M. Baljuzović, S.V. Mentus, N.V. Skorodumova, I.A. Pašti, Interactions of alkali metal ions with OH-functionalized graphene - DFT studies and some experimental evidence, 6th ISE Satellite Student Regional Symposium on Electrochemistry, Book of Abstracts (2016) 16, ISBN 978-953-6470-73-0, Zagreb, Croatia. **0,5 поена**
- 3.2.9. **A.S. Dobrota**, I.A. Pašti, N.V. Skorodumova, Corrugation and Doping Effects on the Reactivity of the Graphene Basal Plane - A Theoretical Study, Fourth Conference of Young Chemists of Serbia, Book of Abstracts (2016) 84, ISBN: 978-86-7132-064-1, Belgrade, Serbia. **0,5 поена**
- 3.2.10. **A.S. Dobrota**, I.A. Pašti, First principles insights into graphene electronic and chemical properties modification by substitutional doping, 2nd International Meeting on Materials Science for Energy Related Applications, Book of Abstracts, (2016) 81, ISBN: 978-86-82139-62-1, Belgrade, Serbia. **0,5 поена**
- 3.2.11. S. Gutić, **A.S. Dobrota**, I.A. Pašti, Simultaneous electrochemical reduction of graphene oxide and deposition of nickel: effect of reduction time on catalytic properties towards the hydrogen evolution reaction, 2nd International Meeting on Materials Science for Energy Related Applications, Book of Abstracts, (2016) 65, ISBN: 978-86-82139-62-1, Belgrade, Serbia. **0,5 поена**

3.2.12. **A.S. Dobrota**, I.A. Pašti, Graphene functionalization for Na-ion storage applications - Theoretical insights, Fourteenth Young Researchers' Conference - Materials Sciences and Engineering: Program and the Book of Abstracts, Institute of Technical Sciences of SASA (2015) 25, ISBN: 978-86-80321-31-8, Belgrade, Serbia. **0,5 поена**

3.2.13. **A.S. Dobrota**, I.A. Pašti, Graphene-oxide as an electrode material for Na-ion batteries - theoretical study, Third Conference of Young Chemists of Serbia, Book of Abstracts (2015) 83, ISBN: 978-86-7132-059-7, Belgrade, Serbia. **0,5 поена**

3.2.14. **A. Dobrota**, I. Pašti, Modification of electronic and chemical properties of graphene by oxygen-containing functional groups - First principles study, Thirteenth Young Researchers' Conference - Materials Sciences and Engineering: Program and the Book of Abstracts, Institute of Technical Sciences of SASA (2014) 22, ISBN: 978-86-80321-30-1, Belgrade, Serbia. **0,5 поена**

На основу критеријума за процену научне компетентности кандидата у групацији природно-математичких наука, кандидат је остварио следеће квантитативно изражене резултате:

Укупно: M = 102,53 (за научног сарадника потребно 16)

M10+M20+M31+M32+M33+M41+M42 = 89,6 1(потребно 10)

M11+M12+M21+M22+M23+M24 = 88,78 (потребно 6).

В. Квалитативна оцена научног доприноса

1. Показатељи успеха у научном раду

Научно-истраживачка активност др Ане Доброта била је усмерена на теоријско моделовање и анализу материјала на бази графена за примене у конверзији и складиштењу енергије, помоћу DFT прорачуна.

Публикације приказане у тачки Б квантитативно вишеструко превазилазе минималне критеријуме потребне за избор у звање научни сарадник и јасно показују да се кандидаткиња успешно бавила научно-истраживачким радом у протеклом периоду. Од тога се посебно може истаћи 9 радова публикованих у реномираним међународним часописима, од чега 1 рад у међународном часопису изузетне вредности.

Члан је Друштва физикохемичара Србије, Српског хемијског друштва и Матице српске. Била је члан организационог одбора скупа *2nd International Meeting on Materials Science for Energy Related Applications*, у организацији Факултета за физичку хемију и *KTH - Royal Institute of Technology*, а у сарадњи са Друштвом физикохемичара Србије, 2016. године.

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

Научно-истраживачка активност др Ане Доброта усмерена је на моделовање материјала на бази графена модификованих присуством различитих дефеката, за примене у електрохемијским системима за конверзију и складиштење енергије. Кроз своја истраживања кандидаткиња се бавила везом електронске структуре и реактивности датих материјала, као и развијањем стратегија за дизајн материјала са погодном електронском структуром за циљане примене. Таква веза испитана је детаљно је нпр. за легуре прелазних метала, али за случај угљеничних материјала још увек није позната, те рад кандидаткиње на споменутим проблемима представља значајан допринос.

Кандидаткиња је дала допринос при реализацији једног дипломског рада урађеног на Факултету за физичку хемију и била је члан комисије за одбрану истог. Активно учествује у популаризацији науке и у организацији манифестација „Наука око нас“ на Факултету за физичку хемију, као и на манифестацији „Ноћ истраживача“.

3. Организација научног рада

Кандидаткиња је од 2015. године учесник у научном пројекту „Литијум-јон батерије и горивне ћелије - истраживање и развој“, бр. ИИИ45014, Министарства за науку Републике Србије, чији је руководилац др Славка Ментуса, редовни професор у пензији Факултета за физичку хемију и редовни члан Српске академије наука и уметности. Учесница је и међународних пројеката „DURAPEM - Novel materials for durable proton exchange membrane fuel cells“, NATO Emerging Security Challenges Division (SPS Programme), DANUBE REGION пројекта „Композити проводних полимера“ и „Modelling of complex materials“ (Swedish National Infrastructure for Computing, број 2016/34-32). Током 2015. године провела је месец дана на KTH – Royal Institute of Technology (Стокхолм, Шведска) у оквиру студијске посете групи чији је руководилац проф. др Наталија Скородумова.

4. Квалитет научних резултата

Кандидаткиња је публиковала 14 радова у међународним часописима (од тога један рад у међународном часопису изузетне вредности (M21a), девет радова у врхунским међународним часописима (M21), два рада у истакнутим међународним часописима (M22), и један рад у међународном часопису (M23). Осим тога, имала је и петнаест саопштења на међународним конференцијама (од којих је једно штампано у целини, а четрнаест у изводу). Кандидаткиња је први аутор на пет радова у међународним часописима. Резултати су

цитирани у научној литератури 79 пута, од чега 55 пута од стране других аутора (извор - индексна база Scopus). Према Google Scholar-у кандидаткиња је цитирана 114 пута. Вредност *h*-индекса је 5 а без ауоцитата 4 (извор - индексна база Scopus). Према Google Scholar-у вредност *h*-индекса је 7.

Г. Кратак приказ радова

Материјали на бази графена препознати су као одлични кандидати за примене у областима конверзије и складиштења енергије. Док је чист графен хемијски инертан и показује релативно слабу интеракцију са врстама од интереса за електрохемијске примене у овој области, увођење структурних дефеката резултује изменом његове електронске структуре и реактивности. Дизајн материјала погодних својстава за циљане примене један је од дугорочних циљева науке о материјалима. Теоријски прорачуни могу пружити увид у електронску структуру и реактивност материјала и на тај начин проценити могућност његове примене у системима за конверзију и складиштење енергије.

Кандидаткиња је коришћењем прорачуна на бази теорије функционала густине испитивала утицај модификације хемијске и електронске структуре графена на његову реактивност и могућност примене у метал-јонским батеријама (са акцентом на натријум-јонске батерије), за складиштење водоника и електрокатализу реакција издвајања водоника и редукције кисеоника. Модификација својстава постигнута је увођењем кисеоничних група, допаната (B, N, P, S) и моноваканције на графенску раван. Посебна пажња посвећена је оксидацији графена и значају присуства кисеоничних функционалних група на њему, како би теоријски модел био што боља репрезентација реалног материјала. Резултати теоријских прорачуна корелисани су са експерименталним подацима и дате су опште смернице за дизајн материјала погодних за наведене примене. Утицај корекције на дисперзионе интеракције испитан је као додатни фактор који у неким случајевима може утицати на опште закључке од значаја за споменуте примене.

Теоријски прорачуни коришћени су како у чисто теоријским радовима, тако и као предиктивна метода (рад 2.3.1.), као и за објашњавање експериментално уочених трендова (радови 2.2.3, 2.2.6, 2.2.8, 2.3.2. и 2.4.1.).

Оцена комисије о научном доприносу кандидата са образложењем

На основу приложене и прикупљене документације о кандидату, биографских података и прегледа научно-истраживачког рада, Комисија закључује да кандидаткиња Ана

Доброта, доктор физичкохемијских наука, запослена као асистент на Факултету за физичку хемију, поред одбрањене докторске дисертације, има: 13 радова у међународним часописима (од тога 1 рад у међународном часопису изузетне вредности M21a, 9 радова у врхунским међународним часописима M21, 2 рада у истакнутим међународним часописима M22 и 1 рад у међународном часопису M23, као и 15 саопштења на међународним конференцијама (од којих је 1 штампано у целини, а 14 у изводу). Резултати су цитирани у научној литератури 79 пута, од чега 55 пута од стране других аутора.

Према свему наведеном може се закључити да је др Ана Доброта у области физичкохемијских наука остварила резултате који је, у скаладу са Правилником о поступку и начину вредновања и квантитативном исказивању научно-истраживачких резултата истраживача Националног савета за научни и технолошки развој Републике Србије, квалификују за избор у звање научни сарадник.

Комисија стога сматра да су испуњени сви услови на основу којих Наставно-научно веће Факултета за физичку хемију Универзитета у Београду може да утврди предлог да др **Ана Доброта** буде изабрана у звање **научни сарадник**.

У Београду, 13.4.2018.

КОМИСИЈА:

др Славко Ментус, редовни професор у пензији
Универзитет у Београду – Факултет за физичку хемију,
редовни члан Српске академије наука и уметности

др Игор Пашти, ванредни професор
Универзитет у Београду – Факултет за физичку хемију

др Милена Петковић, ванредни професор
Универзитет у Београду – Факултет за физичку хемију

др Биљана Шљукић Паунковић, доцент
Универзитет у Београду – Факултет за физичку хемију

др Владимир Панић, научни саветник
Универзитет у Београду
Институт за хемију, технологију и металургију