

Ана С. Доброта

Доктор физичкохемијских наука
Доцент Факултета за физику хемију

Датум и место рођења:

16. јун 1990. године, Вараждин

Е-пошта: ana.dobrota@ffh.bg.ac.rs

Научни профили:

- [Google Scholar](#)
- [ORCID](#)
- [SCOPUS](#)
- [Research Gate](#)

ОБРАЗОВАЊЕ

	Доктор физичкохемијских наука
2014-2017	Универзитет у Београду – Факултет за физичку хемију Докторска дисертација „Теоријска анализа функционализације графена за примене у конверзији и складиштењу енергије“, одбрањена 25.12.2017. године
	Мастер физикохемичар
2013-2014	Универзитет у Београду – Факултет за физичку хемију, просечна оцена: 10,00 Завршни рад „Теоријска анализа адсорпције Н, О и ОН на графен-оксиду“, одбрањен 17.07.2014. године
	Дипломирани физикохемичар
2009-2013	Универзитет у Београду – Факултет за физичку хемију, просечна оцена: 9,89 Завршни рад „Теоријска студија површина Ni_xMo_{1-x} “, одбрањен 15.07.2013. године
	Трећа београдска гимназија
2005-2009	Природно-математички смер

РАДНО ИСКУСТВО

2020-	Доцент , Универзитет у Београду – Факултет за физичку хемију • Датум избора у звање: 28.11.2019. • Ужа научна област <i>Физичка хемија – хемијска термодинамика, материјали</i>
2016-2020	Асистент за област физичка хемија, Универзитет у Београду – Факултет за физичку хемију
2015-2016	Истраживач-приправник Универзитет у Београду – Факултет за физичку хемију

НАУЧНИ РАДОВИ И ЦИТИРАНОСТ

Коаутор **39 радова** објављена у научним часописима, од чега су 4 у међународним часописима изузетних вредности (M21a), 23 у врхунским међународним часописима (M21), 8 у истакнутим међународним часописима (M22), 2 у међународним часописима (M23), 1 у националном часопису (M53) и 1 у осталим научним часописима. Коаутор је и **32 саопштења са међународних конференција**, од којих је 31 штампано у изводу, укључујући и **једно предавање по позиву**. Резултати споменутих радова цитирани су у научној литератури **958** пута, од чега **848** пута од стране других аутора, уз *h*-индекс **21**, а без аутоцитата **20** (индексна база *Scopus*). Према *Google Scholar*-у цитирана је 1156 пута, а вредност *h*-индекса је 22 (подаци на дан 8.4.2024. године).

УЧЕШЋЕ НА ПРОЈЕКТИМА

Национални пројекти

Након последњег избора у звање:

2020-2022	"Rational design of multifunctional electrode interfaces for efficient electrocatalytic hydrogen production", ПРОМИС пројекат, Фонд за науку Републике Србије, учесник
-----------	--

Пре последњег избора у звање:

2015-2019	„Литијум јон батерије и горивне ћелије – истраживање и развој“, бр. ИИИИ45014 Министарство образовања, науке и технолошког развоја Републике Србије, учесник
-----------	---

Међународни пројекти

Након последњег избора у звање:

2024-	“Osmosis-Assisted Seawater Electrolysis for Green Offshore Hydrogen Production” (SeaCAT) NATO Science for Peace and Security Programme, No. G6230, учесник
2023-	“Modelling of complex materials“ <i>National Academic Infrastructure for Supercomputing in Sweden</i> , учесник
2020-2023	“Optimizing Fuel Cell Catalyst Stability upon Integration with Reforming“ (OFICeR) NATO Science for Peace and Security Programme, No. G5729, учесник
2020-2022	“Proton Exchange Membrane Fuel Cells: boosting the corrosion/degradation resistance of the electrocatalyst” билатерални пројекат између Р. Србије и Р. Словеније, руководилац српске стране
2020-2022	„Електроспиновани и карбонизовани лигнин за електрохемијску примену“, мултилатерални пројекат сарадње у дунавском региону, учесник

Додатно:

2023-2024	“Energy Revolution by Hydrogen Evolution“ (HYDROLYZER) Пројекат Фонда за иновациону делатност Републике Србије
-----------	---

Пре последњег избора у звање:

2019-2020	“New approaches to the understanding of the electrochemical properties of nanocarbons under operating conditions” Билатерални пројекат између Р. Србије и С.Р. Немачке, учесник
2018-2019	“Theoretical and experimental development of novel sensor based on graphene composites for the detection of organophosphate pesticides” Билатерални пројекат између Р. Србије и С.Р. Немачке, учесник
2017-2018	„Композити проводних полимера“ DANUBE REGION пројекат, учесник
2015-2018	“DURAPEM - Novel materials for durable proton exchange membrane fuel cells“ NATO Emerging Security Challenges Division, SPS Programme, учесник
2015-2022	“Modelling of complex oxides“ <i>Swedish National Infrastructure for Computing</i> , учесник

СТРУЧНА УСАВРШАВАЊА

Након последњег избора у звање:

14.01-08.02.2020.	Гостујући постдокторски истраживач на <i>KTH – Royal Institute of Technology</i> (Стокхолм, Шведска), носилац стипендије <i>Carl Tryggers</i> фондације
Пре последњег избора у звање:	
10.06-29.07.2019.	Гостујући постдокторски истраживач на <i>KTH – Royal Institute of Technology</i> (Стокхолм, Шведска), носилац стипендије <i>Carl Tryggers</i> фондације
16.09-20.09.2019.	Летња школа <i>Quantum ESPRESSO Summer School on Advanced Materials and Molecular Modelling</i> , Институт „Јожеф Штефан“, Љубљана, Словенија
15.06-20.07.2018.	Гостујући истраживач на <i>Center for High Performance Computing PDC-KTH</i> (Стокхолм, Шведска), у оквиру <i>HPC-Europa3</i> транснационалног H2020 програма “ <i>Transnational Access Programme for a Pan-European Network of HPC Research Infrastructures and Laboratories for scientific computing</i> ”
16.11-14.12.2015.	Гостујући истраживач на <i>KTH – Royal Institute of Technology</i> (Стокхолм, Шведска) у групи <i>Multiscale Materials Modelling</i>
2015.	<i>TRAIN (Training & Research for Academic Newcomers)</i> програм Универзитета у Београду

НАСТАВНА ДЕЛАТНОСТ

Од јануара 2020. године предметни је наставник на курсевима Математичке методе у физичкој хемији (обавезни предмет на IV години основних академских студија) и Практикум из математике за физикохемичаре (изборни предмет на I години основних академских студија). Од новог акредитационог циклуса, од школске 2021/22. године, задужена је и за предмете Теоријски аспекти науке о површинама (мастер академске студије физичке хемије) и Графен (докторске академске студије физичке хемије). На студентским анкетама вредновања педагошког рада наставника Факултета за физичку хемију оцењена је следећим просечним оценама (по предметима и школским годинама):

Студијски програм - предмет	Шк. 2020/21.	Шк. 2021/22.	Шк. 2022/23.	Шк. 2023/24.
ОАС – Математичке методе у физичкој хемији	4,14*	4,70*	4,61	4,20
ОАС – Практикум из математике за физикохемичаре	4,60*	4,86*	4,85	4,74
МАС – Теоријски аспекти науке о површинама	Н	5,00*	-	Курс у току
ДАС – Графен	Н	-	5,00	Курс у току

* *Online* настава услед *Covid-19* пандемије, Н – нови предмети уведени од шк. 2021/22.

Менторства и учешће у комисијама за одбрану завршних радова

- Ментор једне одбрањене докторске дисертације:
С.А. Андрић „Синтеза и карактеризација течно ексфолираног графена за примену у детекцији влажности ваздуха“, датум одбране 7.12.2023.
- Ментор четири одбрањена дипломска рада;
- Ментор два одбрањена мастер рада (један од њих награђен Пупиновом наградом Матице српске);
- Члан комисије за одбрану две докторске дисертације;
- Члан комисије за одбрану четири дипломска рада (за које није ментор);
- Члан комисије за одбрану пет мастер радова (за које није ментор);
- Ментор за три завршене стручне праксе у оквиру Центра за научно-истраживачки рад студентата Факултета за физичку хемију.

РЕЦЕНЗЕНТСКА АКТИВНОСТ

Почевши од 2018. године, рецензирала је преко 20 манускрипта за *peer review* међународне научне часописе, укључујући једну рецензију за *Journal of Materials Chemistry A* (IF 14.511, рангиран 18/165 за област Физичке хемије), шест рецензија за *Applied Surface Science* (IF 7.392, рангиран 1/20 за област Науке о материјалима) и четири рецензије за *International Journal of Hydrogen Energy* (IF 7.139, рангиран 8/30 за област Електрохемије).

НАГРАДЕ И ПРИЗНАЊА

Након последњег избора у звање:

- *L'Oréal-UNESCO* национално признање „За жене у науци“ за 2023. годину (у партнерству компаније *L'Oréal* Балкан, Комисије Републике Србије за сарадњу са *UNESCO*-м и Министарства науке, технолошког развоја и иновација);

Пре последњег избора у звање:

- Пупинова награда Матице српске за најбоље мастер радове (друго место, 2017);
- Награда Фондације Сестре Булајић за најбољи дипломски рад из области физичке хемије (2015);
- Диплома „Павле Савић“ Друштва физикохемичара Србије за успех током основних студија физичке хемије (2014);
- Специјална повеља Српског хемијског друштва за одличан успех током основних студија (2014);
- Стипендиста Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије, града Београда и Фонда за младе таленте Републике Србије, током основних и мастер студија.

ЧЛАНСТВА У ТЕЛИМА И КОМИСИЈАМА ФФХ (након последњег избора у звање)

- Члан Савета ФФХ-УБ у сазивима 2018-2021 и 2022-2025. године;
- Члан Тима за акредитацију ФФХ-УБ учествовала је у процесу акредитације ФФХ-УБ за циклус 2021-2028. године;
- Члан Комисије за упис и пријем студената на основне академске студије Физичке хемије (за шк. 2021/22. и 2022/23. годину), у оквиру које је и припремала тестове за пријемне испите из математике;

- Члан комисије за спровођење поступка утврђивања предлога кандидата за декана Факултета за период шк. 2021/2022, 2022/2023 и 2023/2024. година, и поново за период период шк. 2024/2025, 2025/2026 и 2026/2027. година;
- Члан комисије за спровођење поступка утврђивања предлога кандидата за продекане Факултета за период шк. 2021/2022, 2022/2023 и 2023/2024. година;
- Члан комисије за спровођење избора три продекана Факултета за период шк. 2021/2022, 2022/2023 и 2023/2024. година;
- Члан комисије за припрему распореда наставе у шк. 2021/22. години;
- Члан комисије за спровођење тајног гласања за избор 12 чланова Савета ФФХ-УБ из редова чланова Наставно-научног већа, за мандатни период 2022-2025.

ОСТАЛЕ АКТИВНОСТИ И ЧЛАНСТВА

Након последњег избора у звање:

- Чланица локалног организационог одбора скупа 9th *Regional Symposium on Electrochemistry - South-East Europe*, Нови Сад, 2023, који организује ASEEE - Association of South-East European Electrochemists;
- Чланица међународног научног и саветодавног одбора скупа 4th *International Congress of Chemists and Chemical Engineers of Bosnia and Herzegovina* (30.06-02.07.2022. Сарајево);
- Чланица пројектног тима Факултета за физичку хемију за *Европску ноћ истраживача*, подржану од стране Европске комисије у оквиру Марија Склодовска-Кири акције 2022 и 2023. године;
- Чланица организационог одбора скупа 4th *International Meeting on Materials Science for Energy Related Applications*, у организацији Факултета за физичку хемију и KTH–Royal Institute of Technology (Стокхолм, Шведска) 2021. године;
- Један од уредника књиге апстраката скупа 4th *International Meeting on Materials Science for Energy Related Applications* (2021);
- Промоција Факултета за физичку хемију кроз бројна гостовања у медијима у оквиру програма „За жене у науци“.

Пре последњег избора у звање:

- Чланица организационих одбора скупова 2nd и 3rd *International Meeting on Materials Science for Energy Related Applications*, у организацији Факултета за физичку хемију и KTH–Royal Institute of Technology (Стокхолм, Шведска), 2016 и 2018. године;
- Чланица локалних извршних одбора скупова *Physical Chemistry 2016*, *Physical Chemistry 2018* и *Physical Chemistry 2021*;
- председавање секцијама на тему теоријског моделовања материјала у оквиру скупова 15th и 16th *Young Researchers' Conference*, у организацији *Materials Research Society of Serbia*;
- Ментор за израду три одбрањена дипломска рада и два одбрањена мастер рада на Факултету за физичку хемију (један од којих је награђен другом Пупиновом наградом Матице српске за 2023. годину);
- Чланица пројектног тима Факултета за физичку хемију за *Европску ноћ истраживача*, подржану од стране Европске комисије у оквиру Марија Склодовска-Кири акције 2018-2020. године;
- Организација и извођење већег броја догађаја који популаризују науку, укључујући манифестације *Наука око нас*, *Ноћ истраживача*, *Фестивал науке*;
- Чланица Друштва физикохемичара Србије и Српског хемијског друштва.

1. Поглавље у монографији (M14)

- 1.1. I.A. Pašti, A.S. Dobrota, S.V. Mentus, *Modelling and Simulations of Nanostructures*, in Fascinating World of Nanosciences and Nanotechnologies, Serbian Academy of Sciences and Arts, Lecture series, book 6 (2020) ISBN978-86-7025-859-4.
https://dais.sanu.ac.rs/bitstream/id/39017/bitstream_39017.pdf

2. Радови објављени у научним часописима међународног значаја

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

- 2.1.1. J. Milikić, M. Martins, A.S. Dobrota, G. Bozkurt, G.S. Soylu, A.B. Yurtcan, N.V. Skorodumova, I.A. Pašti, B. Šljukić, D.M. Santos. A Pt/MnV_2O_6 nanocomposite for the borohydride oxidation reaction. J. Energy Chem. 55 (2021) 428-436. <https://doi.org/10.1016/j.jechem.2020.07.029>
- 2.1.2. U. Lačnjevac, R. Vasilic, A. Dobrota, S. Đurđić, O. Tomanec, R. Zbořil, S. Mohajernia, N.T. Nguyen, N. Skorodumova, D. Manojlović, N. Elezović, I. Pašti, P. Schmuki. High-performance hydrogen evolution electrocatalysis using proton-intercalated TiO_2 nanotube arrays as interactive supports for Ir nanoparticles. J. Mater. Chem. A 8(43) (2020) 22773-22790. <https://doi.org/10.1039/d0ta07492f>
- 2.1.3. I.A. Pašti, E. Fako, A.S. Dobrota, N. Lopez, N.V. Skorodumova, S.V. Mentus. Atomically thin metal films on foreign substrates - from lattice mismatch to electrocatalytic activity. ACS Catal. 9(4) (2019) 3467-3481. <https://doi.org/10.1021/acscatal.8b04236>
- 2.1.4. 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. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2017.12.046>

2.2. Радови у врхунским међународним часописима (M21):

- 2.2.1. A.Z. Jovanović, A.S. Dobrota, N.V. Skorodumova, I.A. Pašti. Reactivity of Stone-Wales defect in graphene lattice – DFT study. FlatChem 42 (2023) 100573. <https://doi.org/10.1016/j.flatc.2023.100573>
- 2.2.2. M.N. Krstajić Pajić, A.S. Dobrota, A. Mazare, S. Đurđić, I. Hwang, N.V. Skorodumova, D. Manojlović, R. Vasilic, I.A. Pašti, P. Schmuki, U. Lačnjevac. Activation of Osmium by the Surface Effects of Hydrogenated TiO_2 Nanotube Arrays for Enhanced Hydrogen Evolution Reaction Performance. ACS Appl. Mater. Interfaces 15 (2023) 31459-31469. <https://doi.org/10.1021/acsaami.3c04498>
- 2.2.3. I.A. Pašti, A.S. Dobrota, D.B. Migas, B. Johansson, N.V. Skorodumova. Theoretical analysis of electrochromism of Ni-deficient nickel oxide – From bulk to surfaces. Phys. Chem. Chem. Phys. 25 (2023) 7974-7985. <https://doi.org/10.1039/D2CP05467A>
- 2.2.4. M. Ritopečki, A.S. Dobrota, N.V. Skorodumova, I.A. Pašti. The Local Coordination Effects on the Reactivity and Speciation of Active Sites in Graphene-Embedded Single-Atom Catalysts over Wide pH and Potential Range. Nanomaterials 12(23) (2022) 4309. <https://doi.org/10.3390/nano12234309>
- 2.2.5. A.Z. Jovanović, L. Bijelić, A.S. Dobrota, N.V. Skorodumova, S.V. Mentus, I.A. Pašti. Enhancement of hydrogen evolution reaction kinetics in alkaline media by fast galvanic displacement of nickel with rhodium—from smooth surfaces to electrodeposited nickel foams. Electrochim. Acta 414 (2022) 140214. <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2022.140214>
- 2.2.6. A.S. Dobrota, N.V. Skorodumova, S.V. Mentus, I.A. Pašti. Surface pourbaix plots of $M@N_4$ -graphene single-atom electrocatalysts from density functional theory thermodynamic modeling. Electrochim. Acta 412 (2022) 140155. <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2022.140155>

- 2.2.7. G. Cha, I. Hwang, S. Hejazi, A.S. Dobrota, I.A. Pašti, B. Osuagwu, H. Kim, J. Will, T. Yokosawa, Zd. Badura, Š. Kment, S. Mohajernia, A. Mazare, N.V. Skorodumova, E. Spiecker, P. Schmuki. *As a single atom Pd outperforms Pt as the most active co-catalyst for photocatalytic H₂ evolution*. iScience 24(8) (2021) 102938. <https://doi.org/10.1016/j.isci.2021.102938>
- 2.2.8. K.A. Novčić, A.S. Dobrota, M. Petković, B. Johansson, N.V. Skorodumova, S.V. Mentus, I.A. Pašti. *Theoretical analysis of doped graphene as cathode catalyst in Li-O₂ and Na-O₂ batteries - the impact of the computational scheme*. Electrochim. Acta 354 (2020) 136735. <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2020.136735>
- 2.2.9. A.S. Dobrota, I.A. Pašti, S.V. Mentus, B. Johansson, N.V. Skorodumova. *Altering the reactivity of pristine, N- and P-doped graphene by strain engineering: A DFT view on energy related aspects*. Appl. Surf. Sci. 514 (2020) 145937. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2020.145937>
- 2.2.10. D. Karačić, S. Korać, A.S. Dobrota, I.A. Pašti, N.V. Skorodumova, S.J. Gutić. *When supporting electrolyte matters – Tuning capacitive response of graphene oxide via electrochemical reduction in alkali and alkaline earth metal chlorides*. Electrochim. Acta 297 (2019) 112-117. <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2018.11.173>
- 2.2.11. N.P. Diklić, A.S. Dobrota, I.A. Pašti, S.V. Mentus, B. Johansson, N.V. Skorodumova. *Sodium storage via single epoxy group on graphene – The role of surface doping*. Electrochim. Acta 297 (2019) 523-528. <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2018.11.108>
- 2.2.12. A. Jovanović, A.S. Dobrota, L.D. Rafailović, S.V. Mentus, I.A. Pašti, B. Johansson, N.V. Skorodumova. *Structural and electronic properties of V₂O₅ and their tuning by doping with 3d elements—modelling using the DFT+U method and dispersion correction*. Phys. Chem. Chem. Phys. 20(20) (2018) 13934-13943. <https://doi.org/10.1039/C8CP00992A>
- 2.2.13. D. Chanda, A.S. Dobrota, J. Hnát, Z. Sofer, I.A. Pašti, N. V. Skorodumova, M. Paidar, K. Bouzek. *Investigation of electrocatalytic activity on a N-doped reduced graphene oxide surface for the oxygen reduction reaction in an alkaline medium*. Int. J. Hydrogen Energy, 43(27) (2018) 12129-12139. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2018.05.012>
- 2.2.14. N. Gavrilov, M. Momčilović, A.S. Dobrota, D. Stanković, B. Jokić, B. Babić, N.V. Skorodumova, S.V. Mentus, I.A. Pašti. *A study of ordered mesoporous carbon doped with Co and Ni as a catalyst of oxygen reduction reaction in both alkaline and acidic media*. Surf. Coat. Technol. 349 (2018) 511-521. <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2018.06.008>
- 2.2.15. 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. <https://doi.org/10.1039/C7CP07542A>
- 2.2.16. 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. <https://doi.org/10.1039/C7CP07276G>
- 2.2.17. 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 43(35) (2018) 16846-16858. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2017.11.131>
- 2.2.18. 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. <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2017.07.186>
- 2.2.19. 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. <https://doi.org/10.1039/C7CP00344G>
- 2.2.20. 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. <https://doi.org/10.1039/C7CP01237C>

- 2.2.21. 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. <https://doi.org/10.1039/C5CP07612A>
- 2.2.22. 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. <https://doi.org/10.1039/C5CP04238K>
- 2.2.23. 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. <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2015.07.125>

2.3. Радови у истакнутим међународним часописима (M22):

- 2.3.1. M.S. Ritopečki, N.V. Skorodumova, A.S. Dobrota, I.A. Pašti. Density Functional Theory Analysis of the Impact of Boron Concentration and Surface Oxidation in Boron-Doped Graphene for Sodium and Aluminum Storage. *C* 9 (2023) 92. <https://doi.org/10.3390/c9040092>
- 2.3.2. S.J. Gutíć, D. Metarapi, A.Z. Jovanović, G.K. Gebremariam, A.S. Dobrota, B. Nedić Vasiljević, I.A. Pašti. Redrawing HER Volcano with Interfacial Processes – The Role of Hydrogen Spillover in Boosting H₂ Evolution in Alkaline Media. *Catalysts* 13(1) (2023) 89. <https://doi.org/10.3390/catal13010089>
- 2.3.3. G.K. Gebremariam, A.Z. Jovanović, A.S. Dobrota, N.V. Skorodumova, I.A. Pašti. Hydrogen Evolution Volcano(es) - From Acidic to Neutral and Alkaline Solution. *Catalysts* 12(12) (2022) 154. <https://doi.org/10.3390/catal12121541>
- 2.3.4. A.S. Dobrota, J. Vlahović, N.V. Skorodumova, I.A. Pašti. First-principles analysis of aluminium interaction with nitrogen-doped graphene nanoribbons – from adatom bonding to various potential applications. *Mater. Today Commun.* 31 (2022) 103388. <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2022.103388>
- 2.3.5. A.S. Dobrota, T. Đokić, N.V. Skorodumova, S.V. Mentus, I.A. Pašti. What Is the Real State of Single-Atom Catalysts under Electrochemical Conditions - From Adsorption to Surface Pourbaix Plots? *Catalysts* 11 (2021) 1207. <https://doi.org/10.3390/catal11101207>
- 2.3.6. S.J. Gutíć, A.S. Dobrota, E. Fako, N.V. Skorodumova, N. López, I.A. Pašti. Hydrogen Evolution Reaction - From Single Crystal to Single Atom Catalysts. *Catalysts* 10(3) (2020) 290. <https://doi.org/10.3390/catal10030290>
- 2.3.7. A.S. Dobrota, S. Gutíć, 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. <https://doi.org/10.1039/C6RA13509A>
- 2.3.8. 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. <https://doi.org/10.1007/s12678-015-0271-0>

2.4. Радови у међународним часописима (M23):

- 2.4.1. I.A. Pašti, A.S. Dobrota, N.M. Gavrilov, G. Ćirić-Marjanović, S.V. Mentus. Effects of alkali metal cations on oxygen reduction on N-containing carbons viewed as the interplay between capacitive and electrocatalytic properties: Experiment and theory. *J. Serb. Chem. Soc.* 84(8) (2019) 901-914. <https://doi.org/10.2298/JSC190426072P>

- 2.4.2. S. Gutić, A.S. Dobrota, N. Gavrilov, M. Baljžović, 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. <https://doi.org/10.20964/2016.10.47>

2.5. Рад у националном часопису (M53):

- 2.5.1. A.S. Dobrota, I.A. Pašti. *A Review of Theoretical Studies on Functionalized Graphene for Electrochemical Energy Conversion and Storage Applications*. Current Phys. Chem. 6(4) (2016) 244-265. <https://doi.org/10.2174/1877946807666170102155447>

2.6. Остали научни радови са DOI бројем и/или доступни у бази Scopus

- 2.6.1. A.S. Dobrota, I.A. Pašti. *Chemisorption as the essential step in electrochemical energy conversion*. J. Electrochem. Sci. Eng. 10(2) (2020) 141-159. <https://doi.org/10.5599/jese.742>

3. Зборници са међународних научних скупова

3.1. Предавање по позиву са међународног скупа штампано у изводу (M32)

- 3.1.1. A.S. Dobrota, *Imperfections in graphene and their role in energy related applications: DFT insights*, Serbian Ceramic Society Conference, Advanced Ceramics and Application X, New Frontiers in Multifunctional Material Science and Processing - Program and the Book of Abstracts (September 26-27th, 2022) p. 49, ISBN 978-86-915627-9-3, Belgrade, Serbia.

3.2. Саопштења са међународних скупова штампана у целини (M33)

- 3.2.1. 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.

3.3. Саопштења са међународних скупова штампана у изводу (M34):

- 3.3.1. A.S. Dobrota, I.A. Pašti, *Ni-based surface phases boosting H₂O dissociation and H₂ production – theoretical insights*, Contemporary research in the field of hydrogen as the fuel of the future – Book of Abstracts, University of Belgrade – Faculty of Physical Chemistry (2022) p. 35, ISBN 978-86-82139-84-3, Belgrade, Serbia
- 3.3.2. M.S. Ritopečki, A.S. Dobrota, *A DFT study of the influence of chemical environment and boron concentration in boron-doped graphene on its reactivity*, 19th Young Researchers' Conference - Materials Science and Engineering: Program and the Book of Abstracts, Institute of Technical Sciences of SASA (2021) p. 45, ISBN 978-86-80321-36-3, Belgrade, Serbia
- 3.3.3. J. Vlahović, A.S. Dobrota, N.V. Skorodumova, I.A. Pašti, *Nitrogen-doped graphene nanoribbons: DFT prospects for Al-ion battery application*, 19th Young Researchers' Conference - Materials Science and Engineering: Program and the Book of Abstracts, Institute of Technical Sciences of SASA (2021) p. 47, ISBN 978-86-80321-36-3, Belgrade, Serbia
- 3.3.4. B. Nedić Vasiljević, A. Dobrota, I. Pašti, *Application of Generalized Coordination Number as Platinum Dissolution Descriptor*, 4th International Meeting on Materials Science for Energy Related Applications Book of Abstracts, University of Belgrade – Faculty of Physical Chemistry (2021) p. 44, ISBN 978-86-82139-82-9, Belgrade, Serbia
- 3.3.5. T. Djokic, I. Pasti, A. Dobrota, *What is the State of Single Atom Catalysts under Electrochemical Conditions – DFT Study of SACs Embedded in Graphene Lattice?*, 72nd Annual Meeting of the International Society of Electrochemistry, 29 August - 3 September 2021, Jeju Island, Korea/Online (Hybrid)

- 3.3.6. I. Pašti, A. Miladinovic, A. Dobrota, *Kinetic Monte Carlo Modelling of Complex Electrocatalytic Interfaces for Hydrogen Evolution Reaction*, 72nd Annual Meeting of the International Society of Electrochemistry, 29 August - 3 September 2021, Jeju Island, Korea/Online (Hybrid)
- 3.3.7. Ana S. Dobrota, Igor A. Pašti, Natalia V. Skorodumova, *Curving graphene: a path towards enhanced reactivity?*, Eighteenth Young Researchers' Conference - Materials Science and Engineering: Program and the Book of Abstracts, Institute of Technical Sciences of SASA (2019) p. 29, ISBN 978-86-80321-35-6, Belgrade, Serbia.
- 3.3.8. S.G. Mijaković, K.Ž. Tošić, A.S. Dobrota, *Improving sodium bonding to graphene by phosphorus doping: the role of oxidation from a DFT point of view*, 7th Conference of Young Chemists of Serbia, Book of Abstracts, Serbian Chemical Society (2019) p. 141, ISBN: 978-86-7132-076-4, Belgrade, Serbia.
- 3.3.9. A.S. Dobrota, I.A. Pašti, N.V. Skorodumova, *Doped graphene as an electrode material in novel metal-ion batteries: the importance of the oxidation level*, Seventeenth Young Researchers' Conference - Materials Science and Engineering: Program and the Book of Abstracts, Institute of Technical Sciences of SASA (2018) p. 22, ISBN 978-86-80321-34-9, Belgrade, Serbia.
- 3.3.10. I.A. Pašti, A.Z. Jovanović, A.S. Dobrota, N.M. Gavrilov, B. Johansson, N.V. Skorodumova, S.V. Mentus, *Design of novel oxygen reduction reaction electrocatalysts guided by systematic study of atomic adsorption on graphene through the Periodic Table of Elements*, Seventeenth Young Researchers' Conference - Materials Science and Engineering: Program and the Book of Abstracts, Institute of Technical Sciences of SASA (2018) p. 22, ISBN 978-86-80321-34-9, Belgrade, Serbia.
- 3.3.11. S.J. Gutić, I.A. Pašti, A.S. Dobrota, *Graphene materials in energy storage and conversion systems – "low quality" for high performance*, Physics Conference in Bosnia and Herzegovina Book of Abstracts, Physical Society in Federation of Bosnia and Herzegovina (2018) p. 32, ISBN 978-9958-0393-1-7, Sarajevo, Bosnia and Herzegovina.
- 3.3.12. A.S. Dobrota, I.A. Pašti, N.V. Skorodumova, *B-doped graphene as an electrode material in novel metal-ion batteries: the role of dopant concentration*, 6th Conference of Young Chemists of Serbia, Book of Abstracts, Serbian Chemical Society (2018) p. 95, ISBN: 978-86-7132-072-6, Belgrade, Serbia.
- 3.3.13. A.S. Dobrota, I.A. Pašti, N.V. Skorodumova, *How does graphene react to stress?*, 3rd International Meeting on Materials Science for Energy Related Applications, University of Belgrade – Faculty of Physical Chemistry (2018) p. 49, ISBN: 978-86-82139-72-0, Belgrade, Serbia.
- 3.3.14. A.S. Dobrota, I.A. Pašti, N.V. Skorodumova, *Oxygen reduction on graphene: a DFT view on the role of nitrogen functionalities*, 3rd International Meeting on Materials Science for Energy Related Applications, University of Belgrade – Faculty of Physical Chemistry (2018) p. 112, ISBN: 978-86-82139-72-0, Belgrade, Serbia.
- 3.3.15. A.S. Dobrota, I.A. Pašti, S.V. Mentus, N.V. Skorodumova, *Kako učiniti grafen pogodnim za skladištenje natrijuma?*, 5. Dan Elektrokemije & 8th ISE Satellite Student Regional Symposium on Electrochemistry - Book of Abstracts, Croatian Society of Chemical Engineers (2018) p. 42, ISBN: 978-953-6894-65-9, Zagreb, Croatia.
- 3.3.16. S.J. Gutić, I.A. Pašti, A.S. Dobrota, D. Metarapi, *Reducirani grafen oksid – aktivni nosač za elektrokatalizatore*, 5. Dan Elektrokemije & 8th ISE Satellite Student Regional Symposium on Electrochemistry - Book of Abstracts, Croatian Society of Chemical Engineers (2018) p. 38, ISBN: 978-953-6894-65-9, Zagreb, Croatia.
- 3.3.17. A.S. Dobrota, I.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) p. 27, ISBN: 978-86-80321-33-2, Belgrade, Serbia.
- 3.3.18. N.P. Diklić, A.S. Dobrota, I.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) p. 28, ISBN: 978-86-80321-33-2, Belgrade, Serbia.

- 3.3.19. 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.
- 3.3.20. 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.
- 3.3.21. 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) p. 63, Balatonkenese, Hungary.
- 3.3.22. 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.
- 3.3.23. 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) p. 25, ISBN: 978-86-80321-32-5, Belgrade, Serbia.
- 3.3.24. 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) p. 16, ISBN 978-953-6470-73-0, Zagreb, Croatia.
- 3.3.25. 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) p. 84, ISBN: 978-86-7132-064-1, Belgrade, Serbia.
- 3.3.26. 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) p. 81, ISBN: 978-86-82139-62-1, Belgrade, Serbia.
- 3.3.27. 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) p. 65, ISBN: 978-86-82139-62-1, Belgrade, Serbia.
- 3.3.28. 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) p. 25, ISBN: 978-86-80321-31-8, Belgrade, Serbia.
- 3.3.29. 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) p. 83, ISBN: 978-86-7132-059-7, Belgrade, Serbia.
- 3.3.30. 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) p. 22, ISBN: 978-86-80321-30-1, Belgrade, Serbia.