

Дефекти у графену: теоријски осврт са аспекта конверзије и складиштења енергије

Ана С. Доброта

Универзитет у Београду – Факултет за физичку хемију

ana.dobrota@ffh.bg.ac.rs

Још од његовог експерименталног открића, графен се сматра веома перспективним материјалом за различите примене, а значајан напор је уложен у производњу графена високе чистоће. Са растућом потребом за новим, одрживим енергетским решењима, примене графена у конверзији и складиштењу енергије постале су централна тема многих истраживачких група. Када су у питању савремени електрохемијски енергетски системи, идеални графен није најпожељнији електродни материјал, како је његова реактивност према хемијским врстама од интереса релативно ниска (нпр. према металним јонима, за примене у метал-јонским батеријама). Уграђивање различитих дефеката и функционалних група у и на базалну раван графена доводи до промене његове геометријске и електронске структуре, а самим тим и реактивности. Ова промена у великој мери зависи од врсте и концентрације унетих дефеката. Теорија функционалне густине (енг. *Density Functional Theory, DFT*) омогућава теоријски увид у утицај различитих дефеката на претходно споменута својства материјала. У овом излагању биће направљен преглед својстава графена са различитим типовима дефеката, укључујући редуковани графен оксид, супституционо допирани графен и различите врсте азотних дефеката.

Др Ана С. Доброта – биографија

Рођена је 1990. године у Вараждину. Основну и средњу школу завршила је у Београду. Основне академске студије Факултета за физичку хемију Универзитета у Београду (ФФХ-УБ) завршила је 2013. године. Школовање на истом факултету наставила је кроз мастер академске студије физичке хемије, које је завршила 2014. године, када је и уписала докторске академске студије на ФФХ-УБ. Докторску дисертацију „Теоријска анализа функционализације графена за примене у конверзији и складиштењу енергије“ одбранила је 2017. године.

Од 2015. године запослена је као истраживач-приправник на ФФХ-УБ, на пројекту Министарства образовања, науке и технолошког развоја Републике Србије „Литијум јон батерије и горивне ћелије – истраживање и развој“, бр. ИИИ45014. Од 2016. године запослена је као асистент на ФФХ-УБ, а од 2020. као доцент на истом факултету, за ужу научну област Физичка хемија – хемијска термодинамика, материјали. Учествовала је на неколико међународних и билатералних пројеката, као и на ПРОМИС пројекту "*Rational design of multifunctional electrode interfaces for efficient electrocatalytic hydrogen production*" (RatioCAT) финансираном од стране Фонда за науку Републике Србије. Тренутно учествује на међународним пројектима "*Optimizing Fuel Cell Catalyst Stability upon Integration with Reforming*", OFICeR, бр. G5729 (NATO Science for Peace and Security Programme, 2020-2023. године) и „Моделовање комплексних материјала“ (*Swedish National Infrastructure for Computing*).

Боравила је на *KTH – Royal Institute of Technology* (Стокхолм, Шведска) као гостујући истраживач у групи *Multiscale Materials Modelling* у два наврата 2015. и 2019. године. Током 2018. године учествовала је у *HPC-Europa3* транснационалном H2020 програму "*Transnational Access Programme for a Pan-European Network of HPC Research Infrastructures and Laboratories for scientific computing*", као гостујући истраживач на *Center for High Performance Computing PDC-KTH* (Стокхолм, Шведска).

Аутор је 30 радова објављених у научним часописима и преко 25 саопштења са међународних конференција. У научно-истраживачком раду 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 бави се везом електронске структуре и реактивности датих материјала, као и развијањем стратегија за дизајн материјала са погодном електронском структуром за циљане примене. Резултати споменутих радова цитирани су у научној литератури 577 пута, а вредност *h*-индекса је 15 (извор - индексна база *Scopus*, без аутоцитата). Активна је и као рецензент у неколико научних часописа.

Била је чланица организационих одбора скупова 2nd, 3rd и 4th *International Meeting on Materials Science for Energy Related Applications (IMMSERA)*, у организацији Факултета за физичку хемију и *KTH–Royal Institute of Technology* (Стокхолм, Шведска), 2016, 2018. и 2021. године, као и чланица локалних извршних одбора скупова *Physical Chemistry 2016, 2018* и *2021*. Један је од уредника књиге апстраката скупа 4th *IMMSERA* (2021). У оквиру скупова 15th и 16th *Young Researchers' Conference*, у организацији *Materials Research Society of Serbia*, председавала је секцијама на тему теоријског моделовања материјала.

Осим у наставном и истраживачком раду, активна је и у промоцији науке, као члан организационих тимова манифестација Наука око нас и Ноћ истраживача.