

NASTAVNO-NAUČNOM VEĆU FIZIČKOG FAKULTETA UNIVERZITETA U BEOGRADU

Pošto smo na IX sednici Nastavno-naučnog veća Fizičkog fakulteta Univerziteta u Beogradu održanoj 09.09.2026. godine određeni za članove komisije za ocenu ispunjenosti uslova i opravdanosti predložene teme za izradu doktorskog rada Mateje Jovanovića „Multiskalne molekularne simulacije strukture, hidratacije i transporta protona u polimernim elektrolitskim membranama (Multi-Scale Molecular Simulations of Structure, Hydration, and Proton Transport in Polymer Electrolyte Membranes)” i određivanje mentora disertacije, podnosimo sledeći

IZVEŠTAJ

1 Biografski podaci

Mateja Jovanović je rođen 17. novembra 1998. godine u Beogradu. Osnovnu školu i gimnaziju završio je u Jagodini. Osnovne studije fizike na smeru "Teorijska i eksperimentalna fizika" završio je 2022. godine na Fizičkom fakultetu Univerziteta u Beogradu, a potom je master studije na istom smeru završio 2023. godine. Master rad pod nazivom „The simulations of structural, thermodynamical, and mechanical characteristics of the mixture of ionic liquid and water using molecular dynamics: example of $[\text{bmim}]^+[\text{PF}_6]^-$ ionic liquid” odbranio je 2023. godine, pod rukovodstvom dr Miljana Dašića (Institut za fiziku u Beogradu) i dr Sunčice Elezović-Hadžić (Fizički fakultet Univerziteta u Beogradu). Mateja Jovanović je 2023. godine upisao doktorske studije na Fizičkom fakultetu Univerziteta u Beogradu, na modulu Fizika. Sada je student treće godine doktorskih studija, položio je sve ispite predviđene planom i programom doktorskih studija.

Mateja Jovanović je od 2025. godine zaposlen kao istraživač pripravnik na Institutu tehničkih nauka Srpske akademije nauka i umetnosti u Beogradu, gde učestvuje u istraživanjima u oblasti računarske fizike i molekularnih simulacija materijala za elektrohemijsku konverziju energije, pod mentorstvom dr Miljana Dašića i dr Igora Stankovića. U periodu 2023–2025. godine bio je angažovan kao doktorand u okviru Corporate Data Sciences divizije kompanije Freudenberg Technology Innovation SE & Co. KG u Vajnhajmu, Nemačka. U okviru doktorskih studija učestvuje kao Marie Skłodowska-Curie doktorand u evropskom projektu Horizont Evropa – MSCA Doctoral Network 101072578 „BLESSED: Bridging Models at Different Scales to Design New Generation Fuel Cells for Electrified Mobility” (2023–2026). Učestvovao je na više međunarodnih radionica i letnjih škola u okviru ove mreže (SISSA, Trst; TU Wien, Beč; Toyota Motor Europe,

Brisel; Univerzitet Pikardija Žil Vern, Amijen; Nacionalni tehnički univerzitet u Atini), kao i na radionici Training School on the MecaNano Challenges (Rim, 2023) i TAPS Summer School (Toruń, 2021).

Oblasti interesovanja kandidata obuhvataju molekularnu dinamiku, računarsku fiziku meke materije, kvantno-hemijske proračune i fiziku polimernih elektrolitskih membrana za primenu u gorivnim ćelijama i elektrolizerima.

Objavljeni naučni radovi kandidata:

- [1] Igor Stanković, Miljan Dašić, Mateja Jovanović, and Ashlie Martini. Effects of Water Content on the Transport and Thermodynamic Properties of Phosphonium Ionic Liquids. *Langmuir*, 40(17):9049–9058, April 2024. ISSN 0743-7463, 1520-5827. doi: 10.1021/acs.langmuir.4c00372.
- [2] Mateja Jovanović, Nicolas Bernhard, Matthias Baldofski, Marcin Rybicki, Miljan Dašić, and Igor Stanković. Linking Density and Nanoscale Crystallinity to Hydration in Nafion PEMFC Membranes: Insights From Experiment and Molecular Dynamics Simulations. *Small Structures*, 7(3):e202500573, March 2026. ISSN 2688-4062, 2688-4062. doi: 10.1002/ssstr.202500573.

Izabrane reference predloženih mentora:

dr Miljan Dašić:

- [1] Jovanović, M., Bernhard, N., Baldofski, M., Rybicki, M., Dašić, M., & Stanković, I. Linking Density and Nanoscale Crystallinity to Hydration in Nafion PEMFC Membranes: Insights From Experiment and Molecular Dynamics Simulations. *Small Structures*, 7, e202500573 (2026). ISSN: 2688-4062; Journal Impact Factor: 11.3.
- [2] Cammarata, A., Dašić, M., & Nicolini, P. Integrating Newton’s Equations of Motion in the Reciprocal Space. *The Journal of Chemical Physics*, 161(8), 084111 (2024). ISSN: 0021-9606 (Print), 1089-7690 (Online); Journal Impact Factor: 3.7.
- [3] Dašić, M., Almog, R., Agmon, L., Yehezkel, S., Halfin, T., Jopp, J., Ya’akovitz, A., Berkovich, R., & Stanković, I. Role of Trapped Molecules at Sliding Contacts in Lattice-Resolved Friction. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 16(33), 44249–44260 (2024). ISSN: 1944-8244 (Print), 1944-8252 (Online); Journal Impact Factor: 8.3.
- [4] Stanković, I., Dašić, M., Jovanović, M., & Martini, A. Effects of Water Content on the Transport and Thermodynamic Properties of Phosphonium Ionic Liquids. *Langmuir*, 40(17), 9049–9058 (2024). ISSN: 0743-7463 (Print), 1520-5827 (Online); Journal Impact Factor: 3.9.
- [5] Dašić, M., Ponomarev, I., Polcar, T., & Nicolini, P. Tribological Properties of Vanadium Oxides Investigated with Reactive Molecular Dynamics. *Tribology International*, 175, 107795 (2022). ISSN: 0301-679X; Journal Impact Factor: 6.2.

dr Igor Stanković:

- [1] Jovanović, M., Bernhard, N., Baldofski, M., Rybicki, M., Dašić, M., & Stanković, I. Linking Density and Nanoscale Crystallinity to Hydration in Nafion PEMFC Membranes: Insights From Experiment and Molecular Dynamics Simulations. *Small Structures*, 7, e202500573 (2026). ISSN: 2688-4062; Journal Impact Factor: 11.3.
- [2] Aslam, M. A., Stanković, I., Murastov, G., Carl, A., Khan, M. Z., Song, Z., Watanabe, K., Taniguchi, T., Lugstein, A., Teichert, C., Gorbachev, R., Rodriguez, R. D., & Matković, A. Ferroelectricity in Graphene Nanoribbon Devices Enabled by Collective Water Molecule Dynamics. *Nature Communications*, 16, Article 10982 (2025). ISSN: 2041-1723 (Online); Journal Impact Factor: 15.7.
- [3] Rodríguez, S. J., Candia, A. E., Stanković, I., Passeggi, M. C. G., & Ruano, G. D. Study of In-Plane and Interlayer Interactions during Aluminum Fluoride Intercalation in Graphite: Implications for the Development of Rechargeable Batteries. *ACS Applied Nano Materials*, 6(18), 16977–16985 (2023). ISSN: 2574-0970; Journal Impact Factor: 5.3.
- [4] Noël, O., Mazeran, P.-E., & Stanković, I. Nature of Dynamic Friction in a Humid Hydrophobic Nanocontact. *ACS Nano*, 16(7), 10768–10774 (2022). ISSN: 1936-0851 (Print), 1936-086X (Online); Journal Impact Factor: 16.1.
- [5] Pešić, J., Leitner, S., Neilson, J., et al. Imaging Junctions in Two-Dimensional Semiconductor Nanosheet Networks. *npj 2D Materials and Applications*, 9, Article 90 (2025). ISSN: 2397-7132 (Online); Journal Impact Factor: 9.2.

2 Predmet i cilj doktorske teze

Vodonične gorivne ćelije sa proton izmenjivačkom membranom (Proton Exchange Membrane Fuel Cells, PEMFC) predstavljaju jednu od najperspektivnijih tehnologija za dekarbonizovane energetske sisteme. Elektrohemijskim procesima pretvaraju hemijsku energiju vodonika u električnu energiju, uz vodenu paru kao jedini nusproizvod reakcije. Zahvaljujući visokoj gravimetrijskoj i volumetrijskoj gustini snage, niskoj radnoj temperaturi i brzom hladnom startu, PEMFC tehnologija našla je primenu u rasponu od prenosive elektronike do teškog drumskog i pomorskog saobraćaja. Ipak, visoka cena i ograničena trajnost sklopa membrana-elektroda (membrane electrode assembly, MEA) i dalje predstavljaju glavnu prepreku široj primeni ove tehnologije, što motiviše dalja fundamentalna istraživanja materijala koji određuju performanse ćelije.

Polimerne elektrolitske membrane (PEM) predstavljaju centralnu komponentu gorivnih ćelija, elektrolizera i drugih uređaja za elektrohemijsku konverziju energije. Glavna funkcija membrane

je provođenje protona između elektroda, dok njene performanse zavise od složene međuzavisnosti morfologije polimera, sadržaja vode i mehanizma transporta protona. Iako je postignut značajan napredak u razvoju proton-provodljivih materijala, molekulski mehanizmi koji povezuju strukturu membrane, hidrataciju i transportna svojstva još uvek nisu u potpunosti razjašnjeni. Transport protona u hidratizanim PEM membranama određen je hijerarhijom strukturne organizacije koja obuhvata molekulske mreže vodoničnih veza, morfologiju vode na nanoskali i kristaliničnost membrane na mezoskali.

NafionTM, perfluorosulfonski (PFSA) jonomer koji je razvio DuPont, ostao je industrijski standard više od pet decenija zahvaljujući izuzetnoj hemijskoj i mehaničkoj stabilnosti u kombinaciji sa visokom protonskom provodljivošću u hidratisanom stanju. Svojstva membrane zavise od sadržaja vode, izraženog preko parametra hidratacije λ , definisanog kao broj molekula vode po sulfonskoj grupi. Pri niskoj hidrataciji ($\lambda < 6$) molekuli vode su čvrsto koordinisani oko sulfonatnih grupa, što značajno ograničava pokretljivost protona. Sa porastom λ formira se perkolirajuća mreža vode unutar hidrofilnih nanokanala, što drastično povećava protonsku provodljivost.

Odnos gustine i hidratacije Nafiona ispitivan je eksperimentalno i računarski tokom više decenija, pri čemu su rezultati simulacija molekulske dinamike (MD) međusobno neusaglašeni: dok jedan broj studija izveštava o odstupanju gustine od idealnog zakona mešanja, posebno pri niskim hidratacijama, druge studije izveštavaju o ponašanju bližem teorijskoj predikciji. Tačnost klasičnih simulacija molekulske dinamike kritično zavisi od izbora polja sila (force field), pri čemu transport protona u Nafionu posebno zavisi od parametara koji opisuju hidronijum-jon (H_3O^+), gde je preciznije opisivanje raspodele naelektrisanja neophodno da bi se pravilno reprodukovala referentna struktura solvatacije i energija.

Cilj ove doktorske teze je uspostavljanje fizički konzistentnog opisa hidratacije, organizacije vodoničnih veza i transporta protona u hidratizanim polimernim elektrolitskim materijalima, kombinovanjem simulacija molekulske dinamike, kvantno-hemijskih proračuna i statističko-termodinamičke analize, sa ciljem identifikovanja strukturnih i termodinamičkih faktora koji određuju pokretljivost protona na različitim dužinskim skalama, koristeći Nafion kao reprezentativni model-sistem.

3 Osnovne hipoteze i metode istraživanja. Očekivani rezultati

Predloženo istraživanje integriše tri komplementarne računarske skale: (i) klasične MD simulacije hidratizanih proton izmenjivačkih membrana (sa Nafionom kao reprezentativnim modelom) radi karakterizacije strukturnih svojstava u različitim nivoima hidratacije i morfologijama polimera na nanometarskoj skali; (ii) kvantno-hemijske proračune radi dobijanja DFT-referentnih podataka za parametrizaciju polja sila hidronijum-jona; i (iii) statističko-termodinamičku analizu slobodnih

energija vodoničnih veza iz dugih ravnotežnih trajektorija.

Osnovna hipoteza istraživanja je da gustina hidratisanog Nafiona zavisi zajednički od sadržaja vode i stepena kristaliničnosti polimera, te da odstupanja od idealnog zakona mešanja primećena u prethodnim MD studijama potiču od razlika u kristaliničnosti uzoraka, a ne od nedostataka polja sila. Za opisivanje odnosa gustine i hidratacije uvodi se analitički model zasnovan na idealnom zakonu mešanja, korigujući gustinu vode u ograničenom prostoru fenomenološkom Hoover-Hess funkcijom. Model Nafiona sa stepenom polimerizacije 10 (ekvivalentna težina $EW = 1100$) simulira se za šest nivoa hidratacije ($\lambda = 3, 6, 9, 12, 15, 20$), pri čemu se generišu tri podgrupe konfiguracija, amorfne, kristalinične i polukristalinične, različitim protokolima kaljenja (annealing) i deformacije smicanjem. Fazno specifične gustine Nafiona i vode izdvajaju se Voronoi tesalacijom MD snimaka, dok se morfologija vodenih klastera karakteriše DBSCAN algoritmom radi određivanja praga perkolacije.

Druga hipoteza je da postojeći klasični modeli hidronijum-jona ne reprodukuju dovoljno tačno interakcionu energiju i geometriju kompleksa hidronijum-voda dobijene na DFT nivou tačnosti. Radi provere ove hipoteze, geometrija Eigen kompleksa ($H_3O^+ \cdot 3H_2O$) optimizuje se na M06-2X/def2-QZVP nivou teorije, parcijalna naelektrisanja određuju se ESP fitovanjem, a preostali Lennard-Jones parametri hidronijum-jona optimizuju se tako da reprodukuju referentnu interakcionu energiju, čime se dobija novo polje sila bazirano na DFT proračunima pogodno za dalje simulacije hidratiranih PEM membrana.

Treća hipoteza je da termodinamika vodoničnih veza, odnosno slobodna energija njihovog formiranja, zavisi od nivoa hidratacije i strukture membrane, i da upravo ova zavisnost kontroliše formiranje proton-provodnih puteva. Slobodna energija vodonične veze računa se iz dvodimenzionalnog potencijala srednje sile (PMF) u prostoru rastojanja donor–akceptor R i ugla donor–H...akceptor θ , poređenjem raspodele dobijene iz MD trajektorija sa analitički izvedenom raspodelom potpuno slučajnog (neinteragujućeg) referentnog stanja, uz primenu metode procene gustine jezgra (kernel density estimation) radi smanjenja statističkog šuma.

Očekuje se da će se ovim pristupom pokazati da je gustina hidratisanog Nafiona određena kombinovanim efektom sadržaja vode i kristaliničnosti, da nanokonfinirana voda u hidrofilnim kanalima membrane dostiže povećanu efektivnu gustinu u odnosu na slobodnu (bulk) vodu, da novo razvijeno polje sila za hidronijum-jon tačnije reprodukuje DFT referentne podatke od postojećih modela iz literature, i da profil slobodne energije vodoničnih veza objašnjava eksperimentalno posmatrani prag protonske provodljivosti Nafiona u zavisnosti od hidratacije. Na osnovu ovih rezultata očekuje se da će biti uspostavljen jedinstven računarski okvir koji povezuje morfologiju membrane, stanje hidratacije i transport protona, primenjiv i na alternativne proton provodne polimere od značaja za buduće PEM elektrolizatore i gorivne ćelije.

Na osnovu dosadašnjeg rada kandidata, očekujemo da će ovi zadaci biti realizovani i publikovani u nekoliko radova u vodećim međunarodnim časopisima.

4 Zaključak

Kandidat Mateja Jovanović je ispunio sve propisane uslove za pristupanje izradi doktorske disertacije, odnosno položio je sve ispite na doktorskim studijama i odbranio temu dokorskog rada na Kolegijumu doktorskih studija u julu 2026. godine. Na osnovu gore izloženog, zaključujemo da je tema disertacije značajna, da se uklapa u savremena istraživanja u oblasti računarske fizike i nauke o materijalima, da je dobro definisana, kao i da su očekivani naučni doprinosi teze relevantni. Zato komisija predlaže Nastavno-naučnom veću Fizičkog fakulteta Univerziteta u Beogradu da Mateji Jovanoviću odobri izradu disertacije „Multiskalne molekularne simulacije strukture, hidratacije i transporta protona u polimernim elektrolitskim membranama (Multi-Scale Molecular Simulations of Structure, Hydration, and Proton Transport in Polymer Electrolyte Membranes)” pod mentorstvom dr Miljana Dašića i dr Igora Stankovića.

Beograd, 16.09.2026. godine

dr Sonja Grubišić

naučni savetnik, Institut za hemiju, tehnologiju i metalurgiju

dr Svetislav Mijatović

vanredni profesor, Fizički fakultet

dr Vukašin Milošević

docent, Fizički fakultet