

Dr. David M. Smith Životopis

OSOBNOST: Rođen 22.04.1973., Dubbo, Australija. Oženjen, troje djece. Australijsko i hrvatsko državljanstvo.

**SADAŠNJE ZAPOSLENJE I DUŽNOSTI**

- 03.18-: Ravnatelj Instituta Ruđer Bošković (IRB), Zagreb, Hrvatska.

RANIJE RADNO ISKUSTVO

- 03.16-12.17: Predstojnik zavod i znanstveni savjetnik, Zavod za fizičku kemiju (ZFK), IRB, Zagreb.
- 04.16-10.16: Posebni savjetnik ministra znanosti, obrazovanja i sporta za istraživanje i razvoj.
- 10.09-01.14: Pomoćnik ravnatelja za međunarodnu suradnju i projekte (IRB)
- 02.14-02.16: Znanstveni savjetnik, Zavod za organsku kemiju i biokemiju (ZOKB, IRB), Zagreb.
- 09.08-02.16: Voditelj Grupe za kvantnu organsku kemiju (GKOK), ZOKB, IRB.
- 02.08-02.14: Viši znanstveni suradnik, GKOK, ZOKB, IRB
- 03.04-02.08: Znanstveni suradnik, GKOK, ZOKB, IRB.
- 10.01-02.04: Postdoktorsko usavršavanje, Sveučilište Ludwig-Maximilian (LMU), München, Njemačka.
- 04.00-08.01: Postdoktorsko usavršavanje u grupi prof. Maksića, GKOK, ZOKB, IRB

OBRAZOVANJE

- 01.96-03.00: Dr.sci., Research School of Chemistry (RSC), Australian National University (ANU), Canberra, Australija. Mentor: prof. Leo Radom; Disertacija: Theoretical Studies of Coenzyme-B12-Dependent Reactions.
- 3.95-11.95: M.sci. [BSc(Hons)] kemijskih znanosti na ANU Zavod za kemiju; Mentor prof. Gad Fischer; Disertacija: An Ab initio study of the electronic spectrum of the triazine molecules.
- 04.91-11.94: M.sci. [BSc(Hons)] i M.sci.oecc. [BEc], ANU.

MOBILNOST

- 10.09-12.17: Gostujući profesor, grozda izvrsnosti: „Projektiranje naprednih materijala“ (Excellence Cluster for Engineering of Advanced Materials - EAM) na Friedrich-Alexanderovom Sveučilištu Erlangen-Nürnberg - FAU, Njemačka.
- 01.14-09.14: Sabatikal na EAM-FAU, Erlangen, Njemačka.
- 10.08–12.08; 04.08–05.08; 02.05–05.05: Gostujući znanstvenik na School of Chemistry, University of Sydney, Sydney, Australija.
- 02.03-05.03: Gostujući znanstvenik - RSC, ANU, Canberra, Australia.
- 05.97–07.97: Stipendija za gostovanje doktoranada na britanskim sveučilištima Partnerships for Excellence: British Council Postgraduate Bursary za suradnju s profesorom Bernardom Goldingom na Zavodu za kemiju, University of Newcastle upon Tyne, Engleska.

STIPENDIJE, ŠKOLARINE, NAGRADE I DONACIJE

- 11.08: Dobitnik Godišnje nagrade Hrvatskog kemijskog društva “Lavoslav Ružička” za 2008. godinu
- 01.05: Donacija Zaklade Alexander von Humboldt u obliku računalnog klastera vrijednog 20.000 EUR, postavljen na Institutu Ruđer Bošković
- 04.04–04.05 Povratnička stipendija Zaklade Alexander von Humboldt za zemlje Srednje i Istočne Europe, za rad na Institutu Ruđer Bošković.
- 11.03–02.04: Postdoktorska stipendija DFG (Deutsche Forschungsgemeinschaft) za rad na Kemijskom odjelu Sveučilišta Ludwig-Maximilians, München, Njemačka.
- 03.02–10.03: Stipendija Zaklade Alexander von Humboldt (AvH) za boravak i rad na Kemijskom odjelu Sveučilišta Ludwig-Maximilians, München, Njemačka.

- 04.01: Dobitnik Dekanove nagrade za kemiju, za najbolju disertaciju u 2000. godini, na Research School of Chemistry, Australian National University, Canberra, Australija
- 05.97–07.97: Stipendija Britanskog konzulata za doktorski studij (vidi gore).
- 01.96–09.99: Stipendija australske države najboljim studentima za doktorski studij (Australian postgraduate award).
- 03.95–11.95: RSC Stipendija Research School of Chemistry najboljim studentima za izradu diplomskog rada, Australian National University, Canberra, Australija.
- 12.94–03.95: Summer Research Scholarship, stipendija najboljim studentima za izradu kratkog istraživačkog projekta, Research School of Chemistry, Australian National University, Canberra, Australija.

ZNANSTVENI I OSTALI PROJEKTI

- 07.15–10.16: Glavni istraživač (mentor) na projektu Europskog Socijalnog Fonda program za istraživačke stipendije za profesionalni razvoj mladih istraživača i poslijedoktoranada pod nazivom „Mreže za profesionalno usavršavanje mladih znanstvenika u interdisciplinarnim istraživanjima inovativnih površina i materijala“. Vrijednost 2 mil. HRK.
- 01.15–12.19: Glavni istraživač (mentor) projekta "Projekt razvoja karijera mladih istraživača - izobrazba novih doktora znanosti" (HRZZ) u vrijednosti 480 000 HRK.
- 07.14–07.18: Voditelj istraživačkog projekta HrZZ-a: Computational Solutions in the Life Sciences: The Importance of Molecular Flexibility, COMPSOLS- MOLFLEX u vrijednosti 900.000 HRK.
- 10.13–10.15: Suradnik na projektu fonda UKF: Time resolved photoelectron spectroscopy as a probe for ultrafast excited state dynamics, u vrijednosti 185.000 EUR. Voditeljica: Nađa Došlić.
- 07.13–01.17: Voditelj radnog paketa projekta unutar FP7: Enhancement of the Innovation Potential in SEE through New Molecular Solutions in Research and Development – InnoMol, FP7-REGPOT-2012-2013-1, u vrijednosti 4,7 milijuna EUR. Voditelj projekt: Oliver Vugrek.
- 10.10–10.13: Suvoditelj na projektu: Computational Life Sciences on Open Shell Intermediates, financiran od strane Zaklade Alexander von Humboldt (AvH) u vrijednosti od 50.000 EUR.
- 04.07–04.10: Koordinator projekta unutar FP6: Reinforcement of the Centre for Computational Solutions in the Life Sciences (EU-FP6-043749-ReCompSoLS), financiranog od strane EK, u vrijednosti od 380.000 EUR.
- 01.07–12.13: Voditelj projekta: Računalno proučavanje strukture i funkcije proteina (098-0982933-2937), financiranog od MZOS, u vrijednosti od 90.000 HRK godišnje.
- 04.05–12.06: Voditelj projekta: Računalno proučavanje strukture i funkcije proteina (0098151), financiranog od MZOS, u vrijednosti od 30.000 HRK godišnje.

MENTORSTVA

- 01.15–: Voditelj doktorskog rada Marko Hanževački, Nataša Vučemilović-Alagić i Robert Stepić uključen u Integrirani poslijediplomski studij: Napredni materijali i procesi (Integrated Graduate School: Advanced Materials and Processes -IGS) grozda izvrsnosti EAM na FAU.
- 11.15–01.18.: Mentor za Dr. Christian R. Wick, poslijedoktorski istraživač zaposlen na projektu HrZZ na IRB-u.
- 05.09–11.09: Mentor za Dr. Gregory M. Sandala, poslijedoktorski istraživač zaposlen na projektu HrZZ na IRB-u.
- 06.07–07.13: Voditelj doktorskog rada Karmen Čondić-Jurkić, uspješno obranjen unutar IGS, EAM, FAU, Njemačka.
- 05.10–04.16: Voditelj doktorskog rada Zlatko Brkljača, uspješno obranjen unutar IGS, EAM, FAU, Njemačka.
- 05.10–04.16: Voditelj doktorskog rada Zoran Miličević, uspješno obranjen unutar IGS, EAM, FAU, Njemačka.
- 03.09–09.09: Voditelj diplomskog rada Zlatko Brkljača, Zlatka Brkljače, obranjenog na Kemijskom odjelu (KO) Prirodoslovno-matematičkog fakulteta (PMF) Sveučilišta u Zagrebu (SuZ), Ocjena odličan.
- 02.09–06.09: Voditelj diplomskog rada Zorana Miličevića, KO, PMF, SuZ. Ocjena odličan.
- 10.05–06.06: Voditelj diplomskog rada Karmen Čondić-Jurkić's diploma, KO, PMF, SuZ. Ocjena odličan.
- 03.05–11.05: Komentor diplomskog rada Daniel Miller, Zavod za kemiju, University of Sydney (USyd), Australija. Ocjena odličan

RECENZIRANJE

- Stalni recenzent za: *J. Am. Chem. Soc.*; *Chem. Eur. J.*; *J. Chem. Theory Comput.*; *J. Comput. Chem.*; *J. Org. Chem.*; *J. Phys. Chem. Lett.*; *Comput. Theor. Chem.*; *J. Chem. Phys.*; *Langmuir*; *Int. J. Quant. Chem.*; *Mol. Simul.*; *J. Mol. Mod.*; *J. Phys. Org. Chem.*; *Adv. Syn. Cat.*; and *Chirality*.

NASTAVA

- 10.11-: Predavanja iz kolegija Računarska kemija u okviru poslijediplomskog studija Medicinska kemija na Sveučilištu u Rijeci.
- 09.07 & 09.09: Praktikum iz metoda molekularne dinamike and QM/MM računa na znanstvenim skupovima u Opatiji i Primoštenu.
- 03.95–10.98: Asistent na kolegiju Chemistry A11 (uvodni kolegij za studente prve godine dodiplomskog studija), Department of Chemistry, Australian National University.
- 03.9 –10.97 Pomoć pri učenju i instrukcije za velik broj srednjoškolskih učenika, za područje kemije, matematike, fizike i ekonomije.

ODBORI I RADNE SKUPINE

- 02.15-02.18: Član uprave Ruđer Medikal Ciklotron d.o.o.
- 05.12-10.14.: Predstavnik IRB-a unutar European Organization of Research and Technology Organizations (EARTO)..
- 05.12-10-14: Član EARTO radne skupine za Horizon 2020 program.
- 04.11-: Član Povjerenstva za pripremu projekata za strukturne fondove na Institutu Ruđer Bošković.
- 03.11-: Član Povjerenstva za praćenje hrvatskog sudjelovanja u okvirnim programima Europske unije za znanstveno istraživanje i tehnološki razvoj (FP)
- 05.10-: Član odbora za koordinaciju tematske evaluacije IRBa (AZVO).
- 01.10-: Koordinator Povjerenstva za strateške međunarodne projekte na Institutu Ruđer Bošković.

POZVANA PREDAVANJA NA MEĐUNARODNIM KONFERENCIJAMA I INSTITUCIJAMA

- 35 glavnih i pozvanih predavanja na konferencijama, uključujući:
 - 09.17. WATOC2017 (Eleventh Triennial Congress), Munich, Germany.
 - 07.16 ICPOC23 (23rd IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry), Sydney, Australia.
 - 12.15. Pacifichem 2015 u Honolulu, Hawaii, USA.
 - 06.14. CSC2014 (97th Canadian Chemistry Conference), Vancouver, Canada.
 - 04.12. SEB-2012 (3rd Inaugural Symposium on Enzymes & Biocatalysis-2012) u Xi'an, China
 - 07.11. WATOC2011 (Ninth Triennial Congress) u Santiago de Compostela, Spain.
 - 12.10. Pacifichem 2010 u Honolulu, Hawaii, USA.
 - 09.10. CtB2010 (Chemistry towards Biology), Primošten, Croatia.
 - 06.10. From Solid State to Biophysics V, Cavtat, Dubrovnik, Croatia.
 - 02.10. The 24th Molecular Modelling Workshop, Erlangen, Germany.
 - 09.09. ICCMSE 2009 (7th Conference of Comput. Methods in Sci. and Eng.), Rhodes, Greece.
 - 08.09. Gordon Research Conference on Vitamin B₁₂ and Corphins, Oxford, UK.
 - 09.08. TACC2008 (Theory and Applications of Comp. Chem. 2008) u Shanghai, China.
 - 09.08. WATOC2008 (Eighth Triennial Congress) u Sydney, Australia.
 - 07.08. Tine2008 (Trends in Enzymology) u St Malo, France.
- pozvana predavanja i na mnogim internacionalnim institucijama, uključujući:
 - Državni institute za kemiju, Ljubljana, Slovenia;
 - Zavod za kemiju, University of Newcastle upon Tyne, UK;
 - Zavod za Mikrobiologiju, Phillips University, Marburg, Germany;
 - Zavod za kemiju, LMU, Munich, Germany;
 - Zavod za kemiju, University of Sydney Australia,
 - Zavod za kemiju, University of California, Los Angeles, USA.

ORGANIZIRANJE KONFERENCIJA I RADIONICA

Suorganizator slijedećih konferencija i radionica:

06.14: Simpozij u okviru 97th Canadian Chemistry Conference, Vancouver, Kanada

09.13: Ljetna škola: CompSoLS of open-shell intermediates, Primošten, Hrvatska (AvH)

06.13: EARTO Annual Conference, Dubrovnik, Croatia

03.12: Zimska škola Open Shell Intermediates, Minhen, Njemačka (within AvH project)

09.09: The 3rd Adriatic Meeting CompSoLS-a, Primošten, Hrvatska (FP6 & ESF), voditelj sekcije

09.07: The 2nd Opatija Meeting on CompSoLS-a, Opatija, Hrvatska (FP6 & AvH), voditelj sekcije

ČLANSTVA

- ◆ American Chemical Society (ACS),
- ◆ Hrvatsko kemijsko društvo,
- ◆ World Association of Theoretically Oriented Chemists (WATOC).

OBJAVLJENI RADOVI UKUPNO I OD 2010.

Sažet prikaz publiciranja:

Članci WoS	60
Članci Q1 (IF ₂₀₁₆ , JCR)	46
Kumulativni faktor odjeka (IF ₂₀₁₅ , JCR)	442
Prosječni faktor odjeka (IF ₂₀₁₅ , JCR)	7.5
Broj citata (WoS/Research Gate)	1466/1549
h-indeks WoS/Research Gate)	20/21

5 odabrani publikacije:

1. Bucher*, D.; Sandala*, G. M.; Durbeej, B.; Radom*, L.; **Smith*, D. M.** *J. Am. Chem. Soc.* **134** (2012), 1591-1599. The Elusive 5'-Deoxyadenosyl Radical in Coenzyme-B₁₂ -Mediated Reactions.
2. Brkljača, Z.; Čondić-Jurkić, K.; Smith*, A.-S.; **Smith*, D. M.** *J. Chem. Theory Comput.* **8** (2012), 1694–05. Calculation of a CD Spectrum of a Peptide from its Conformational Phase Space: The Case of Met-enkephalin and Its Unnatural Analogue.
3. Dragičević, I.; Barić*, D.; Kovačević, B.; Golding, B. T.; **Smith*, D. M.** *Chem. Eur. J.* **21** (2015), 6132-6143. Non-enzymatic Ribonucleotide Reduction in the Prebiotic Context.
4. Kovačević, B.; Barić, D.; Babić, D.; Bilić, L.; Hanževački, M.; Sandala, G. M.; Radom, L.; **Smith*, D. M.** *J. Am. Chem. Soc.* **140** (2018), 8487-8496. Computational Tale of Two Enzymes: Glycerol Dehydration With or Without B₁₂.
5. Stepić, R.; Wick, C. R.; Strobel, V.; Berger, D.; Vučemilović-Alagić, N.; Haumann, M.; Wasserscheid, P.; Smith, A.-S.; **Smith*, D. M.** *Angew. Chem. Int. Ed. Eng.* **58**, (2019), 741-745 (Inside Cover). Mechanism of the Water–Gas Shift Reaction Catalyzed by Efficient Ruthenium Based Catalysts: A Computational and Experimental Study.

OBJAVLJENI RADOVI U KNJIGAMA, REVIJALNI RADOVI I SAŽECI S KONFERENCIJA

Zajedno sa suradnicima Leo Radom i Greg Sandala koautor na pozvanom poglavlju u knjizi "Encyclopedia of Radicals in Chemistry, Biology and Materials", John Wiley & Sons in 2012. Slični pozvani članci u poglavljima objavljeni su 2006 i 2001. Koautor na više od 40 konferencijskih sažetaka.