

Универзитет у Београду
Институт за хемију, технологију и металургију,
Институт од националног значаја за Републику Србију
Његошева 12, Београд

НАУЧНОМ ВЕЋУ Института за хемију, технологију и металургију

Одлуком Научног већа Универзитета у Београду – Института за хемију, технологију и металургију – Института од националног значаја за Републику Србију (број 233/28.2.2025.) одређени смо за чланове Комисије за подношење Извештаја за избор у звање **виши научни сарадник** кандидата др Иване Вељковић, дипломираног хемичара, научног сарадника Института за хемију, технологију и металургију, Центар за хемију. На основу достављене документације о научно-истраживачком раду кандидата, у складу са *Законом о науци и истраживањима* („Службени гласник РС“ број 49 од 8. јула 2019.) и *Правилником о стицању истраживачких и научних звања* („Службени гласник РС“, број 159 од 30. децембра 2020. год. и број 14 од 20. фебруара 2023.) подносимо Научном већу Института за хемију, технологију и металургију следећи:

ИЗВЕШТАЈ

I БИОГРАФСКИ ПОДАЦИ

Др Ивана С. Вељковић (рођена Антонијевић) рођена је 21. фебруара 1989. године у Београду, где је завршила основну и средњу медицинску школу. Студије хемије уписала је 2008. Године на Хемијском факултету Универзитета у Београду, које је завршила 2013. године са просечном оценом 8,52 и оценом 10 на завршном раду. Мастер студије уписала је 2013. године на истом факултету и завршила их 2014. године са просечном оценом 10,00, одбранивши мастер рад под називом „*Теоријско проучавање паралелних интеракција тетратиафулвалена*“. Докторске студије уписала је 2014. године на Катедри за општу и неорганску хемију Хемијског факултета Универзитета у Београду. Докторску дисертацију под називом „*Проучавање сумпор-сумпор интеракција у кристалним структурама малих молекула и протеина применом информатичких и квантнохемијских метода*“ одбранила је 23. децембра 2019. године.

Запослила се 2015. године као истраживач приправник у Центру за хемију Института за хемију, технологију и металургију Универзитета у Београду, где је била ангажована на пројекту Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије (бр. 172065) под називом „*Нековалентне интеракције рi-система и њихова улога у молекулском препознавању*“, на којем је била учесник до 2019. године. Од 10. јула 2017. године радила је као истраживач сарадник, а у звање научног сарадника изабрана је 30. априла 2020. године на Универзитету у Београду – Институту за хемију, технологију и металургију – Институту од националног значаја за Републику Србију.

Током студија, била је један од најактивнијих студената у организацији научно-едукативних догађаја. Као координатор промоције Хемијског факултета, учествовала је у организацији Фестивала науке, Ноћи музеја, изложбе „*Лабораторија великана – наслеђе српске хемије*“ и пројекта „*Тамо где наука почиње*“, за шта је награђена Похвалницом Хемијског факултета. Била је један од оснивача акције „*Отворене лабораторије*“, у оквиру које су ученици основних и средњих школа имали прилику да учествују у интерактивним експериментима. Такође је учествовала у организацији градских такмичења из хемије и била један од покретача „*Нултих курсева*“ за студенте Хемијског и Биолошког факултета, где је такође била предавач. У периоду од 2010. до 2013. године била је учесник TEMPUS пројекта „*Modernisation of Post-Graduate Studies in Chemistry and Chemistry Related Programmes*“ (JP 511044-2010).

Друштвени ангажман кандидаткиње огледа се и кроз њен рад у оквиру Студентског парламента Хемијског факултета, у коме је била активна од 2009. до 2013. године, обављајући функцију студента продекана у периоду од 2010. до 2012. године. Поред тога, од 2013. до 2018. године била је главни и одговорни уредник студентског часописа „*Позитрон*“, чије је покретање и уређивање имало значајан утицај на промоцију хемије међу младима.

Кандидаткиња је током свог досадашњег научног ангажмана показала изузетну иницијативу у међународној сарадњи. Као добитница престижне стипендије Немачке академске службе за размену DAAD, провела је годину дана на Макс Планк институту за хемијску физику чврстог стања у Дрездену, где је усавршавала своје истраживачке вештине у области кристалографије и рендгенске структурне анализе. Поред тога, учествовала је у билатералном пројекту са Француском, који је био усмерен на проучавање катјон/π интеракција између полицикличних ароматичних угљоводоника и јона прелазних метала.

Др Вељковић је учествовала у пројекту Фонда за науку Србије, у оквиру позива ПРОМИС, под називом „*Рачунарско дизајнирање високоенергетских материјала: случај хелатних комплекса*“ (CD-HEM), који је био посвећен рачунарском дизајну високоенергетских материјала заснованих на комплексима прелазних метала. У периоду од 2020 до 2022, у оквиру CD-HEM пројекта, самостално је руководила подпројектним задатком.

Поред свог доприноса науци, кандидаткиња је била ангажована и у педагошком раду. Учествовала је у извођењу експерименталних вежби на Хемијском факултету из предмета Општа хемија за студенте Биолошког факултета и Неорганска хемија 2 за студенте Универзитета у Београду - Хемијског факултета.

Др Ивана Вељковић је активно учествовала у менторском раду, водећи завршне и мастер радове, као и ангажовањем у комисијама за одбрану.

Као члан Српског кристалографског друштва, др Вељковић је учествовала у организацији 24. а тренутно је један од организатора 30. конференције Српског кристалографског друштва. Такође је била и члан Организационог одбора Друге интерне конференције Института за хемију, технологију и металургију, Корак у искорак 2024.

Професионална активност Др Иване Вељковић обухвата теоријску и рачунарску хемију, са посебним фокусом на проучавање нековалентних интеракција и структурну кристалографију, применом савремених квантохемијских и информатичких метода у анализи молекулских и кристалних структура.

II БИБЛИОГРАФИЈА

Библиографија је разврстана на две листе. Листа А представља радове након претходног избора у звање, а листа Б представља радове пре претходног избора у звање док је целокупна библиографија збир ове две листе (А+Б). Научни рад обележен звездицом (*) је публикован између датума седнице НВ ИХТМ на коме је утврђен предлог одлуке за избор у звање (30. 4. 2020. године) и датума одржавања седнице Комисије за стицање научних звања на којој је донета одлука о избору у звање (28. 2. 2025. године). Радови означени (**) подлежу нормирању, а за сваки нормирани рад дат је број коаутора и израчуната вредност.

Напомена: На основу решења о породилском одсуству, др Ивана Вељковић је започела одсуство 4. 11. 2019. године, а право на одсуство са рада ради неге детета престаје закључно са 31. 8. 2020. године, услед повратка на посао од 1. 9. 2020. године. На основу наведеног, звање научни сарадник је до 30. 8. 2020. године.

(А) Радови од претходног избора у звање

2. Радови објављени у међународним часописима; научна критика, уређивање часописа

Од претходног избора: М20 = 47; Од претходног избора ИФ = 25,064

Радови у истакнутом међународном часопису (М21 = 8; $n \times 8 = 3 \times 8 = 24$)

2.1. I. Veljković, M. Malinić, D. Veljković, Evidence of strong O-H...C interactions involving apical pyramidane carbon atoms as hydrogen atom acceptors, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2025**, 27, 2563–2569; <https://doi.org/10.1039/D4CP03809F>

ISSN: 1463-9076

Издавач: Royal Society of Chemistry

ИФ: 2,9 (2023)

Област, позиција часописа: Physics, Atomic, Molecular and Chemical

Укупан број часописа: 8/35

Цитираност (без аутоцитата): 0

Број аутора: 3

2.2. I. Veljković, D. Kretić, D. Veljković, Geometrical and energetic characteristics of Se...Se interactions in crystal structures of organoselenium molecules, *CrystEngComm*, **2021**, 23, 3383–3390; <https://doi.org/10.1039/D1CE00129A>

ISSN: 1466-8033

Издавач: Royal Society of Chemistry

ИФ: 3,756 (2021)

Област, позиција часописа: Crystallography

Укупан број часописа: 6/26

Цитираност (без аутоцитата): 4

Број аутора: 3

2.3. *I. Veljković, D. Veljković, G. Sarić, I. Stanković, S. Zarić, What is the preferred geometry of sulfur–disulfide interactions?, *CrystEngComm*, **2020**, 22, 7262–7271; <https://doi.org/10.1039/D0CE00211A>

ISSN: 1466-8033

Издавач: Royal Society of Chemistry

ИФ: 3,545 (2020)

Област, позиција часописа: Crystallography

Укупан број часописа: 6/25

Цитираност (без аутоцитата): 1

Број аутора: 5

Радови у истакнутом међународном часопису (M22 = 5; n×5 = 4×5 = 20)

2.4. I. Veljković, A. Đunović, D. Veljković, Influence of halogen substituents on sensitivity towards detonation of polycyclic nitroaromatic high-energy molecules, *J. Phys. Org. Chem.*, **2024**, 3, e4649; <https://doi.org/10.1002/poc.4649>

ISSN: 0894-3230

Издавач: Wiley

ИФ: 1,9 (2023)

Област, позиција часописа: Chemistry, Organic

Укупан број часописа: 27/52

Цитираност (без аутоцитата): 0

Број аутора: 3

2.5. D. Kretić, V. Medaković, **I. Veljković**, Interplay between energy and geometry of parallel-displaced interactions in S₈ dimer structures, *Comput. Theor. Chem.*, **2023**, 1230, 114381; <https://doi.org/10.1016/j.comptc.2023.114381>

ISSN: 2210-271X

Издавач: Elsevier

ИФ: 3,0 (2023)

Област, позиција часописа: Chemistry, Physical

Укупан број часописа: 84/161

Цитираност (без аутоцитата): 0

Број аутора: 3

2.6. I. Veljković, J. Radovanović, D. Veljković, How aromatic system size affects the sensitivities of highly energetic molecules?, *RSC Adv.*, 2021, 11, 31933–31940; <https://doi.org/10.1039/D1RA06482G>

ISSN: 2046-2069

Издавач: Royal Society of Chemistry

ИФ: 4,036 (2021)

Област, позиција часописа: Chemistry, Multidisciplinary

Укупан број часописа: 75/180

Цитираност (без аутоцитата): 4

Број аутора: 3

2.7. D. Kretić, I. Veljković, A. Đunović, D. Veljković, Chelate coordination compounds as a new class of high-energy materials: The case of nitro-bis(acetylacetonato) complexes, *Molecules*, 2021, 26, 5438; <https://doi.org/10.3390/molecules26185438>

ISSN: 1420-3049

Издавач: MDPI

ИФ: 4,927 (2021)

Област, позиција часописа: Chemistry, Multidisciplinary

Укупан број часописа: 65/180

Цитираност (без аутоцитата): 2

Број аутора: 4

Радови у међународном часопису (M23 = 3; n×3 = 1×3 = 3)

2.8. M. Bigović, I. Veljković, J. Petrović, D. Veljković, Quantum-chemical study of C–H…O interactions between H₂CO₄ and aromatic amino acids, *J. Serb. Chem. Soc.*, 2025, <https://doi.org/10.2298/JSC250125013B>

ISSN: 0352-5139

Издавач: Serbian Chemical Society

ИФ: 1,0 (2023)

Област, позиција часописа: Chemistry, Multidisciplinary

Укупан број часописа: 149/175

Цитираност (без аутоцитата): 0

Број аутора: 4

Рад у међународном часопису без М категорије

2.9. D. Kretić, I. Veljković, D. Veljković, Tris(3-nitropentane-2,4-dionato-κ² O,O') complexes as a new type of highly energetic materials: theoretical and experimental considerations, *Chemistry*, 2023, 5, 1843–1854; <https://doi.org/10.3390/chemistry5030126>

ISSN: 2624-8549

Издавач: MDPI

ИФ: 2,4 (2023)

Област, позиција часописа: /

Укупан број часописа: /

Цитираност (без аутоцитата): 1

Број аутора: 3

3. Зборници међународних научних скупова (М30)

Од претходног избора: $M30 = M33 + M34 = 1 + 2,38 = 3,38$

Радови саопштени на скупу међународног значаја, штампани у целини

($M33 = 1$; $n \times 1 = 1 \times 1 = 1$)

3.1. I. Veljković, D. Malenov, S. Zarić, Evaluation of performance of dispersion corrected density functionals for TTF-TTF stacking interactions. Proceedings of the 15th International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry, "Physical Chemistry 2021", 20th – 24th September 2021, Belgrade, Serbia, str. 453–456. ISBN 978-86-82475-39-2. (https://hdl.handle.net/21.15107/rcub_cer_7636)

Радови саопштени на скупу међународног значаја, штампани у изводу

($M34 = 3 \times 0,5 + 2 \times 0,23 + 1 \times 0,42 = 2,38$)

3.2. D. Kretić, A. Đunović, I. Veljković, D. Veljković, How do non-covalent interactions affect the sensitivity of high-energy materials? Analysis of crystal structures of nitroaromatic molecules. Book of Abstracts of the 34th European Crystallographic Meeting (ECM34), 26th – 30th August 2024, Padova, Italy, str. 593. ISSN 2053-2733 (https://hdl.handle.net/21.15107/rcub_cer_8088)

M34 – 0,5

3.3. S. Zarić, D. Malenov, I. Veljković, D. Ninković, D. Veljković, Modification of electrostatic potentials of organometallic compounds as a tool in a design of new class of high energetic materials. Book of Abstracts of the XXIV Conference on Organometallic Chemistry (EuCOMC XXIV Conference), 1st– 3rd September 2021, Madrid, Spain, str. 164. ISBN 978-86-82475-39-2 (https://hdl.handle.net/21.15107/rcub_cer_8339)

M34 – 0,5

3.4.** M. Milovanović, J. Živković, D. Ninković, J. Blagojević Filipović, D. Vojislavljević-Vasilev, **I. Veljković**, I. Stanković, D. Malenov, V. Medaković, D. Veljković, S. Zarić, Study of noncovalent interactions using crystal structure data and quantum chemical calculations. Book of Abstracts of the 15th International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry, 1st – 3rd September **2021**, Belgrade, Serbia, str. 22. ISBN 978-86-82475-39-2 (https://hdl.handle.net/21.15107/rcub_cherry_5354)

M34 – 0,23

(број бодова одређен по формули: $K/(1+0,2(n-5))$, $n>5$)

3.5.** D. Veljković, D. Kretić, **I. Veljković**, D. Malenov, D. Ninković, S. Zarić, Role of hydrogen bonding in modifications of impact sensitivities of high energetic materials: evidence from crystal structures and quantum chemical calculations. Microsymposium, Acta Cryst. A77, 14th– 22th August **2021**, Prague, Czech Republic, str. C813. ISBN 978-86-82475-39-2, <https://journals.iucr.org/a/issues/2021/a2/00/> (<https://doi.org/10.1107/S0108767321088851>)

M34 – 0,42

(број бодова одређен по формули: $K/(1+0,2(n-5))$, $n>5$)

3.6.** M. Milovanović, J. Živković, D. Ninković, J. Blagojević Filipović, D. Vojislavljević-Vasilev, **I. Veljković**, I. Stanković, D. Malenov, V. Medaković, D. Veljković, S. Zarić, Study of noncovalent interactions using crystal structure data in the Cambridge Structural Database. Microsymposium, Acta Cryst. A77, 14th – 22th August **2021**, Prague, Czech Republic, str. C192. ISBN 978-86-82475-39-2, (<http://dx.doi.org/10.1107/S0108767321094903>)

M34 – 0,23

(број бодова одређен по формули: $K/(1+0,2(n-5))$, $n>5$)

3.7. D. Kretić, **I. Veljković**, D. Veljković, Theoretical Study of σ -hole Bonding between Selenium Atoms in Crystal Structures of Organoselenium Compounds. Programme & Abstracts eBook of the 4th International Symposium on Halogen Bonding (ISXB-4 Virtual), 20th – 24th September **2020**, Stellenbosch, South Africa, str. 207. (https://hdl.handle.net/21.15107/rcub_cer_3988)

M34 – 0,5

4. Зборници националних научних скупова (M60)

Од претходног избора: M60 = 3,17

Радови саопштени на скупу националног значаја, штампани у целини (M64 = 15×0,2 + 1×0,17= 3,17)

4.1. **I. Veljković**, D. Kretić, D. Veljković, Influence of the substituents on the sensitivity of high-energy nitroaromatic molecules. Abstracts of the 29th Conference of the Serbian Crystallographic society, 27th–

28th June **2024**, Ruma, Serbia, str. 52–53. ISBN 978-86-912959-7-4
(https://hdl.handle.net/21.15107/rcub_cer_7730)

M64 – 0,2

4.2. I. Veljković, D. Veljković, Comparison of Fenske-Hall and Density Functional Theory methods for clarification of the concept of molecular orbitals in transition metal complexes. Book of Abstracts of the 60th Meeting of the Serbian Chemical Society, 8th–9th June **2024**, Niš, Serbia, str. 100. ISBN 978-86-7132-086-3 (https://hdl.handle.net/21.15107/rcub_cer_7660)

M64 – 0,2

4.3. I. Veljković, M. Malinić, D. Veljković, Elucidating nonclassical hydrogen bonding between water and pyramidine molecule. Book of Abstracts of the 10th Conference of Young Chemists of Serbia, 26th October **2024**, Belgrade, Serbia, str. 14. ISBN 978-86-7132-087-0
(https://hdl.handle.net/21.15107/rcub_cer_8079)

M64 – 0,2

4.4. D. Veljković, M. Malinić, **I. Veljković**, V. Medaković, Strong hydrogen bonds involving carbon atom as hydrogen atom acceptor. Book of Abstracts of the 28th Conference of the Serbian Crystallographic Society, 14th– 15th June **2023**, Čačak, Serbia, str. 15. ISBN 978-86-912959-6-7
(https://hdl.handle.net/21.15107/rcub_cer_6942)

M64 – 0,2

4.5. D. Kretić, V. Medaković, **I. Veljković**, Parallel-displaced interactions between S₈ rings in crystal structures: comprehensive theoretical study. Book of Abstracts of the 28th Conference of the Serbian Crystallographic Society, 14th– 15th June **2023**, Čačak, Serbia, str. 49. ISBN 978-86-912959-6-7
(https://hdl.handle.net/21.15107/rcub_cer_6621)

M64 – 0,2

4.6. I. Veljković, D. Kretić, D. Veljković, Theoretical studies of Se...Se interaction in crystal structures. Book of Abstracts of the 28th Conference of the Serbian Crystallographic Society, 14th – 15th June **2023**, Čačak, Serbia, str. 55. ISBN 978-86-912959-6-7 (https://hdl.handle.net/21.15107/rcub_cer_6701)

M64 – 0,2

4.7. D. Kretić, V. Medaković, **I. Veljković**, Relationship between geometry and energy of interactions in S₈ dimers. Book of Abstracts of the 9th Conference of Young Chemists of Serbia, 4th November **2023**, Novi Sad, Serbia, str. 115. ISBN 978-86-7132-084-9 (https://hdl.handle.net/21.15107/rcub_cer_6827)

M64 – 0,2

4.8. I. Veljković, A. Đunović, D. Veljković, Theoretical study of the influence of halogen substituents on sensitivity of polycyclic nitroaromatic explosives. Book of Abstracts of the 59th Meeting of the Serbian

Chemical Society, 1st– 2nd June **2023**, Novi Sad, Serbia, str. 113. ISBN 978-86-7132-081-8 (https://hdl.handle.net/21.15107/rcub_cer_6654)

M64 – 0,2

4.9. A. Đunović, **I. Veljković**, V. Šajatović, D. Veljković, Role of halogen substituents in the design of halogen-containing high-energy materials. Programme and Book of Abstracts of the Twentieth Young Researchers Conference – Materials Science and Engineering, 30th November – 2nd December **2022**, Belgrade, Serbia, str. 23. ISBN 978-86-80321-37-0 (https://hdl.handle.net/21.15107/rcub_cer_6697)

M64 – 0,2

4.10. D. Kretić, **I. Veljković**, M. Nikola, D. Veljković, Tris-(nitroacetylacetonato) complexes as new high-energy materials. Programme and Book of Abstracts of the Twentieth Young Researchers Conference – Materials Science and Engineering, 30th November – 2nd December **2022**, Belgrade, Serbia, str. 24 ISBN 978-86-80321-37-0 (https://hdl.handle.net/21.15107/rcub_cer_6698)

M64 – 0,2

4.11. D. Kretić, **I. Veljković**, D. Veljković, The chelate complexes as an improved high-energy compounds. Book of Abstracts of the 8th Conference of Young Chemists of Serbia, 29th October **2022**, Belgrade, Serbia, str. 135. ISBN 978-86-7132-080-1 (https://hdl.handle.net/21.15107/rcub_cer_6699)

M64 – 0,2

4.12. A. Đunović, **I. Veljković**, D. Veljković, Influence of the presence of halogen substituents on high-energy properties of nitroaromatic molecules. Book of Abstracts of the 8th Conference of Young Chemists of Serbia, 29th October **2022**, Belgrade, Serbia, str. 136. ISBN 978-86-7132-080-1 (https://hdl.handle.net/21.15107/rcub_cer_6700)

M64 – 0,2

4.13. D. Kretić, **I. Veljković**, A. Đunović, D. Veljković, Nitro-acetylacetonato complexes as a new class of highly energetic materials: synthesis, characterization and quantum chemical studies. Book of Abstracts of the 58th Meeting of the Serbian Chemical Society, 9th – 10th June **2022**, Belgrade, Serbia, str. 152. ISBN 978-86-7132-079-5 (https://hdl.handle.net/21.15107/rcub_cer_6695)

M64 – 0,2

4.14. **I. Veljković**, J. Radovanović, D. Veljković, Theoretical study of the influence of aromatic system size on the sensitivity of nitroaromatic explosives. Book of Abstracts of the 58th Meeting of the Serbian Chemical Society, 9th– 10th June **2022**, Belgrade, Serbia, str. 153. ISBN 978-86-7132-079-5 (https://hdl.handle.net/21.15107/rcub_cer_6696)

M64 – 0,2

4.15. A. Đunović, D. Kretić, **I. Veljković**, D. Veljković, Role of noncovalent interactions in the control of the sensitivity of high energetic molecules towards detonation. Book of Abstracts of the 27th Conference of the Serbian Crystallographic Society, 16th – 17th September **2021**, Kragujevac, Serbia, str. 14. ISBN 978-86-6009-085-2 (https://hdl.handle.net/21.15107/rcub_cer_8340)

M64 – 0,2

4.16.** D. Veljković, D. Kretić, D. Malenov, **I. Veljković**, D. Ninković, S. Zarić, Role of non-covalent interactions in modification of properties of high energetic materials. Book of Abstracts of the 57th Meeting of the Serbian Chemical Society, 18th – 19th June **2021**, Kragujevac, Serbia, str. 98. ISBN 978-86-7132-077-1 (https://hdl.handle.net/21.15107/rcub_cer_5348)

M64 – 0,17

(број бодова одређен по формули: $K/(1+0,2(n-5))$, $n>5$)

Укупно од избора: $M = M21 + M22 + M23 + M33 + M34 + M64 =$

$24 + 20 + 3 + 1 + 2,38 + 3,17 = 53,55$

Укупан ИФ од избора: 27,464 (укључујући рад без М категорије)

(Б) Радови пре претходног избора у звање

1. Монографска студија/поглавље монографији M12 или рад у тематском зборнику међународног значаја ($M14 = 3$; $n \times 1 = 3 \times 1 = 3$)

1.2. Dušan P. Malenov, Ivana S. Antonijević, Snežana D. Zarić, Large Horizontal Displacements of Benzene-Benzene Stacking Interactions in Co-crystals, In MULTI-COMPONENT CRYSTALS: SYNTHESIS, CONCEPTS, FUNCTION (2017) 255-271; ISBN: 978-3-11-046495-5; De Gruyter, Berlin, Germany (<https://cer.ihtm.bg.ac.rs/handle/123456789/2218>)

ISBN: 978-311046495-5; 978-311046365-1

Издавач: Berlin, Germany: Walter de Gruyter GmbH

Цитираност (без аутоцитата): 3

Број аутора: 3

2. Радови објављени у међународним часописима; научна критика, уређивање часописа

Укупно: $M20 = M21a + M21 + M22 = 2 \times 10 + 8 + 5 = 33$

Укупно ИФ = 6,732 + 4,891 + 3,474 + 1,425 = 16,522

Радови у међународном часопису изузетних вредности (M21a = 10; 2×10 =20)

2.1. I. Antonijević, D. Malenov, M. Hall, S. Zarić, Study of stacking interactions between two neutral tetrathiafulvalene molecules in Cambridge Structural Database crystal structures and by quantum chemical calculations, *Acta Cryst.*, **2019**, *B75*, 1–7; <https://doi.org/10.1107/S2052520618015494>

ISSN: 2052-5206

Издавач: Wiley

ИФ: 6,732 (2018)

Област, позиција часописа: Crystallography

Укупан број часописа: 1/45

Цитираност (без аутоцитата): 11

Број аутора: 4

2.2. I. Antonijević, G. Janjić, M. Milčić, S. Zarić, Preferred geometries and energies of sulfur-sulfur interactions in crystal structures, *Cryst. Growth Des.*, **2016**, *16*, 632–639; <https://doi.org/10.1021/acs.cgd.5b01058>

ISSN: 1528-7483

Издавач: American Chemical Society (ACS)

ИФ: 4,891 (2014)

Област, позиција часописа: Crystallography

Укупан број часописа: 1/23

Цитираност (без аутоцитата): 56

Број аутора: 4

Радови у истакнутом међународном часопису (M21 = 8; 1×8 =8)

2.3. D. Malenov, I. Antonijević, M. Hall, S. Zarić, Stacking of cyclopentadienyl organometallic sandwich and half-sandwich compounds. Strong interactions of sandwiches at large offsets, *CrystEngComm*, **2018**, *20*, 4506–4514; <https://doi.org/10.1039/C8CE00597D>

ISSN: 1466-8033

Издавач: Royal Society of Chemistry

ИФ: 3,474 (2016)

Област, позиција часописа: Crystallography

Укупан број часописа: 5/26

Цитираност (без аутоцитата): 11

Број аутора: 4

Радови у истакнутом међународном часопису (M22 = 5; 1×5 =5)

2.4. J. Andrić, **I. Antonijević**, G. Janjić, S. Zarić, Influence of hydrogen bonds on edge-to-face interactions between pyridine molecules, *J. Mol. Model.*, 2018, 24, 60; <https://doi.org/10.1007/s00894-017-3570-y>

ISSN: 1610-2940

Издавач: Springer

ИФ: 1,425 (2016)

Област, позиција часописа: Chemistry, Multidisciplinary

Укупан број часописа: 99/166

Цитираност (без аутоцитата): 5

Број аутора: 4

3. Зборници међународних научних скупова (M30)

Укупно: M30 = 3

Радови саопштени на скупу међународног значаја, штампани у целини
(M34 = 0,5; 6×0,5 =3)

3.1. **I. Antonijević**, I. Stanković, S. Zarić, Analysis of sulfur-sulfur interactions in proteins from the Protein Data Bank, Book of Abstracts of the Protein Electrostatics, 25th – 28th June **2018**, Belgrade, Serbia, str. 57. (https://hdl.handle.net/21.15107/rcub_cer_8345)

M34 – 0,5

3.2. D. Veljković, **I. Antonijević**, S. Zarić, Jimp 2 Software As A Teaching Tool: Understanding Orbitals Using Fenske-Hall Method, Book of Abstracts of the 7th EuroVariety – European Variety in University Chemistry Education, 28th – 30th June **2017**, Belgrade, Serbia, str. 121. (https://hdl.handle.net/21.15107/rcub_cer_3570)

M34 – 0,5

3.3. **I. Antonijević**, Student Magazine POZITRON as a tool in education, Book of Abstracts of the 2nd Scientific Symposium “Theory and Practice of Science in Society: Challenges and Perspectives”, 6th – 7th November **2014**, Belgrade, Serbia, str. 50. (https://hdl.handle.net/21.15107/rcub_cer_8346)

M34 – 0,5

3.4. **I. Antonijević**, D. Malenov, S. Zarić, CCSD(T)/CBS interaction energies and performance of dispersion corrected density functionals on parallel interactions between two tetrathiafulvalene molecules, Book of Abstracts of the Summer School on Applied Supramolecular Chemistry and Workshop on Theoretical Supramolecular Chemistry, 28th July–1st **2014**, Belgrade, Serbia, str. 21. (https://hdl.handle.net/21.15107/rcub_cer_8347)

M34 – 0,5

3.5. I. Antonijević, G. Janjić, M. Stojiljković, S. Kostić, S. Zarić, S...S interactions between cysteine residue in crystal structures, Book of Abstracts of the International Summer School on Supramolecular Chemistry, 4th – 6th August **2013**, Belgrade, Serbia, str. 34. (<https://enauka.gov.rs/handle/123456789/391546>)

M34 – 0,5

3.6. I. Antonijević, G. Janjić, M. Stojiljković, S. Zarić, The crystallographic and quantum-chemical analysis of S...S interactions between cysteine residue, Book of Abstracts of the 2nd International Conference Theoretical Approaches to BioInformation Systems" TABIS2013, 17th – 22th September **2013**, Belgrade, Serbia, str. 3. (https://hdl.handle.net/21.15107/rcub_cer_8349)

M34 – 0,5

4. Зборници националних научних скупова (M60)

Укупно M60 = 1,49

Радови саопштени на скупу националног значаја, штампани у целини
(M64 = 7×0,2 + 1×0,09=1,49)

4.1. I. Veljković, D. Veljković, G. Sarić, S. Zarić, How disulfide bond interacts with sulfur atom? Quantum chemical and crystallographic study, Book of Abstracts of the 7th Conference of the Young Chemists of Serbia, 2nd November **2019**, Belgrade, Serbia str. 158, ISBN 978-86-7132-076-4 (https://hdl.handle.net/21.15107/rcub_cer_8348)

M64 – 0,2

4.2. D. Ninković,** D. Veljković, D. Malenov, M. Milovanović, J. Živković, I. Stanković, **I. Veljković,** V. Medaković, J. Blagojević Filipović, D. Vojislavljević Vasilev, S. Zarić, Noncovalent Interactions of Metal Complexes and Aromatic Molecules, Book of Abstracts of the 26th Conference of the Serbian Crystallographic Society, 27th – 28th June **2019**, Srebrno jezero, Serba, str. 9, ISBN 978-86-912959-5-0 (https://hdl.handle.net/21.15107/rcub_cer_6620)

M64 – 0,09

(број бодова одређен по формули: $K/(1+0,2(n-5))$, $n>5$)

4.3. I. Antonijević, D. Malenov, S. Zarić, Strong stacking interactions between tetrathiafulvalene fragments: crystallographic and quantum chemical study, Book of Abstracts of the 25th Conference of the Serbian Crystallographic Society, June **2018**, Bajina Bašta, Serbia, str. 77, ISBN 978-86-912959-4-3 (https://hdl.handle.net/21.15107/rcub_cer_6606)

M64 – 0,2

4.4. I. Antonijević, D. Veljković, G. Sarić, K. Katančević, S. Zarić, Crystallographic and quantum-chemical study of interactions between sulfur and disulfide bond, Book of Abstracts of the 25th Conference of the Serbian Crystallographic Society, June **2018**, Bajina Bašta, Serbia, str. 67, ISBN 978-86-912959-4-3 (https://hdl.handle.net/21.15107/rcub_cer_6605)

M64 – 0,2

4.5. I. Antonijević, M. Milosavljević, S. Zarić, The study of noncovalent interactions between X-H fragment and a five-member chelate ring of square-planar transition metal complexes, Book of Abstracts of the 24th Conference of the Serbian Crystallographic Society, June 2017, Vršac, Serbia, str. 35., ISBN 978-86-912959-3-6. (https://hdl.handle.net/21.15107/rcub_cer_6604)

M64 – 0,2

4.6. I. Antonijević, D. Malenov, S. Zarić, Crystallographic and quantum-chemical analysis of parallel interaction in tetrathiafulvalene dimer, Book of Abstracts of the 22nd Conference of Serbian Crystallographic Society, 11th – 13th June **2015**, Smederevo, Serbia, str. 61, ISBN 978-86-912959-2-9 (https://hdl.handle.net/21.15107/rcub_cer_6619)

M64 – 0,2

4.7. D. Malenov, I. Antonijević, S. Zarić, Assessment of performance of density functionals by using statistical methods – the case of tetrathiafulvalene stacking, Zbornik radova, 5th Symposium "Mathematics and Applications", Belgrade, 17th – 18th October **2014**, str. 205, ISBN 978-86-7589-104-8 (<https://simpozijum.matf.bg.ac.rs/Knjiga%20apstrakata%202014.pdf>)

M64 – 0,2

4.8. I. Antonijević, G. Janjić, M. Stojiljković, S. Zarić, S...S Interactions in crystal structures, Book of Abstracts of the 24th Conference of Serbian Crystallographic Society, 13th – 15th June **2013**, Avala, Belgrade, Serbia, str. 94, ISSN 0354-5741 (https://hdl.handle.net/21.15107/rcub_cer_6599)

M64 – 0,2

Укупно А+Б: М = 53,55 +40,49 = 94,04

Укупан ИФ А+Б: 27,464+ 16,522 = 43,986

III АНАЛИЗА НАУЧНИХ РЕЗУЛТАТА И ДОПРИНОС КАНДИДАТА ЊИХОВОЈ РЕАЛИЗАЦИЈИ

Научноистраживачки рад др Иване Вељковић припада области теоријске и рачунарске хемије, са фокусом на истраживање нековалентних интеракција у различитим системима путем анализе кристалних структура и квантохемијских прорачуна високог нивоа. Њена истраживања су

усмерена на разумевање и предвиђање интеракција у молекулским и супрамолекулским системима, као и на примену стечених сазнања у дизајну нових материјала.

Од претходног избора у звање научни сарадник, др Ивана Вељковић је објавила девет научних радова у међународним часописима, као и један рад у часопису који још није категорисан. Три рада су објављена у врхунским међународним часописима (M21): *Phys. Chem. Chem. Phys.* (ИФ₂₀₂₃: 2,9), *CrystEngComm* (ИФ₂₀₂₁: 3,756) и *CrystEngComm* (ИФ₂₀₂₀: 3,545). Четири рада су објављена у истакнутим међународним часописима (M22): *J. Phys. Org. Chem.* (ИФ₂₀₂₃: 1,9), *Comput. Theor. Chem.* (ИФ₂₀₂₃: 3,0), *RSC Adv.* (ИФ₂₀₂₁: 4,036) и *Molecules* (ИФ₂₀₂₁: 4,927), при чему је на једном од ових радова (у часопису *Comput. Theor. Chem.*) била аутор одговоран за кореспонденцију. Један рад је објављен у међународном часопису (M23): *J. Serb. Chem. Soc.* (ИФ₂₀₂₃: 1,0), док је један рад публикован у часопису *Chemistry* (ИФ₂₀₂₃: 2,4), којем још није додељена М категорија. Уз то, била је коаутор монографске публикације под насловом *Рачунарско дизајнирање високоенергетских материјала* објављене 2022. године у издању Универзитета у Београду – Хемијског факултета (ISBN: 978-86-7220-115-4).

Током овог периода, др Вељковић је учествовала на седам међународних конференција, где је презентovala један рад саопштен на скупу међународног значаја, штампан у целини (M33), као и шест саопштења штампаних у изводу (M34). Поред тога, била је коаутор 16 радова представљених на скуповима националног значаја, који су штампани у целини (M64).

Научноистраживачки рад др Иване Вељковић обухвата две главне области: проучавање нековалентних интеракција и истраживање високоенергетских материјала.

У првој области, др Вељковић се бави испитивањем водоничних интеракција (C–H...O, O–H...C) и халкогених интеракција (S...S, S...S–S, Se...Se). Ове интеракције су анализирани коришћењем података из кристалних структура и квантнохемијских прорачуна, чиме су добијени важни закључци о најчешћим и најстабилнијим оријентацијама интерагујућих молекула. Поред тога, израчунате су мапе електростатичког потенцијала које прецизно дефинишу регионе интеракције, док је природа ових нековалентних интеракција додатно анализирана SAPT декомпозицијом енергије.

Други правац истраживања односи се на високоенергетске материјале. У оквиру ове области, испитивани су фактори који утичу на стабилност потенцијалних експлозива. Анализирани су ефекти промене дужине полицикличних молекула који садрже -NO₂ групе, као и међусобни утицај ових група на детонационе особине једињења. Такође, испитиван је утицај халогених супституената на стабилност експлозива, што је омогућило боље разумевање фактора који контролишу осетљивост материјала на детонацију. У периоду од 2020. до 2022. године, у оквиру CD-HEM пројекта, др Ивана Вељковић је самостално руководила подпројектним задатком „Утицај величине ароматичних система на осетљивост високоенергетских молекула“. У оквиру овог задатка спровела је свеобухватна теоријска истраживања о корелацији између величине ароматичних система и осетљивости високоенергетских молекула.

Поред тога, коришћењем рачунарског предвиђања, комбинујући параметре енергије дисоцијације везе (BDE) и електростатичког потенцијала (ESP), дизајнирани су нови експлозиви засновани на комплексним једињењима прелазних метала са органским лигандима. Поред теоријских прорачуна, др Вељковић је учествовала и у експерименталном раду, синтези и

карактеризацији комплекса $\text{Co}(\text{AcAc-NO}_2)_3$, за који је доказано да испољава особине високоенергетског материјала.

На основу свега наведеног, може се закључити да је др Ивана Вељковић остварила значајне научне резултате и дала изузетан допринос у својој области истраживања. Резултати истраживања др Вељковић дали су значајан допринос у разумевању фундаменталних аспеката нековалентних интеракција у молекулским и кристалним структурама, као и у дизајну нових високоенергетских материјала са модификованом осетљивошћу на детонацију. Њен научни рад укључује значајан број публикација у међународним часописима, а у једном раду категорије M22 била је и аутор за кореспонденцију.

1. Нековалентне интеракције у молекулским и кристалним структурама

1.1. Халкогене интеракције

Халкогене интеракције ($\text{Se}\cdots\text{Se}$, $\text{S}\cdots\text{S-S}$ и $\text{S}_8\cdots\text{S}_8$) представљају значајан аспект нековалентних интеракција и предмет су истраживања која продужавају и надограђују докторску дисертацију др Вељковић.

Радови А 2.2., А 2.3. и А 2.5. посвећени су теоријском испитивању ових интеракција, при чему је коришћена свеобухватна методологија која обухвата анализу кристалних структура и квантохемијске прорачуне. Претрагом Кембричке базе структурних података (*Cambridge Structural Database – CSD*) издвојене су све кристалне структуре које садрже $\text{Se}\cdots\text{Se}$ контакте, $\text{S}\cdots\text{S-S}$ интеракције и интеракције између осмочланих прстенова сумпора. Анализом геометријских параметара (међусобног растојања интерагујућих атома, углова које формирају средње равни молекула и др.) идентификоване су најчесталије оријентације молекула у оквиру ових интеракција. На основу добијених података, формиран је модел системи који репрезентују најстабилније и најзаступљеније геометрије, а затим су процењиване енергије интеракције применом квантохемијских прорачуна високог нивоа.

Квантохемијским прорачунима израчунате су мапе електростатичког потенцијала за мономере који учествују у интеракцијама, што је омогућило детаљније разумевање региона са позитивним и негативним потенцијалом у молекулима. Добијени резултати показују да се интеракције најчешће формирају позиционирањем молекула тако да је позитиван регион једног молекула усмерен према негативном региону другог молекула, што је у сагласности са принципима електростатичке привлачности. Даљом анализом утврђено је да се оријентације које су најзаступљеније у кристалним структурама углавном поклапају са геометријама које имају најјачу енергију интеракције, што потврђује валидност добијених теоријских закључака. Природа $\text{Se}\cdots\text{Se}$, $\text{S}\cdots\text{S-S}$ и $\text{S}_8\cdots\text{S}_8$ интеракција детаљније је анализирана применом SAPT декомпозиције енергије, која је показала да ове интеракције имају доминантан дисперзиони карактер, уз значајан допринос електростатике.

Значај ових истраживања потврђују радови објављени у истакнутим међународним часописима: две публикације (А 2.2. и А 2.3.) у *CrystEngComm* (категорија M21) и једна (А 2.5.) у *Comput. Theor. Chem.* (категорија M22). Ови радови представљају свеобухватну и систематску

студију халкогених $\text{Se}\cdots\text{Se}$, $\text{S}\cdots\text{S}-\text{S}$ и $\text{S}_8\cdots\text{S}_8$ интеракција, у којој је први пут спроведена детаљна анализа кристалних структура у комбинацији са квантнохемијским прорачунима високог нивоа.

1.2. Водоничне $\text{O}-\text{H}\cdots\text{C}$ и $\text{C}-\text{H}\cdots\text{O}$ интеракције

$\text{O}-\text{H}\cdots\text{C}$ интеракције: неконвенционалне водоничне везе са угљеником као акцептором

У раду А 2.1., објављеном у часопису *Phys. Chem. Chem. Phys.* (M21 категорија), по први пут је дефинисана и систематски анализирана неконвенционална $\text{O}-\text{H}\cdots\text{C}$ водонична веза у којој угљеник делује као акцептор водоника.

Коришћењем квантнохемијских прорачуна високог нивоа, предвиђено је постојање снажне $\text{O}-\text{H}\cdots\text{C}$ интеракције између апикалних атома угљеника пирамидана и његових деривата са молекулима воде. Анализом електростатичких потенцијала утврђено је да се изнад апикалних атома угљеника у свим испитиваним структурама налазе региони изразито негативног потенцијала, што указује на могућност формирања јаке водоничне везе са донирајућим $\text{O}-\text{H}$ групама. Квантнохемијски прорачуни потврдили су да је $\text{O}-\text{H}\cdots\text{C}$ интеракција између водониковог атома воде и апикалног угљеника деривата пирамидана са четири $-\text{CH}_3$ супституента изузетно јака ($\Delta E_{\text{CCSD(T)}/\text{CBS}} = -7.43 \text{ kcal/mol}$). Значајне интеракције су предвиђене и у случају несупституисаног пирамидана ($\Delta E_{\text{CCSD(T)}/\text{CBS}} = -6.41 \text{ kcal/mol}$). Иако је број доступних кристалних структура молекула са пирамидалном геометријом ограничен, претрагом Кембричке базе структурних података (CSD) издвојени су примери молекула са апикалним угљениковим атомима, а затим је анализиран њихов образац формирања водоничних веза. Анализа кристалних структура потврдила је постојање кратких нековалентних контаката између апикалних угљеника и суседних водоникових атома, што додатно подупире теоријске налазе. Ова студија представља пионирски допринос разумевању неконвенционалних водоничних веза, пружајући нове увиде у улогу угљеника као акцептора у нековалентним интеракцијама.

$\text{C}-\text{H}\cdots\text{O}$ интеракције: нековалентне везе између пертехнетске киселине и ароматичних аминокиселина

У раду А 2.8., објављеном у часопису M23 категорије, истражене су $\text{C}-\text{H}\cdots\text{O}$ интеракције између пертехнетске киселине (HTcO_4) и ароматичних аминокиселина (фенилаланина, тирозина и триптофана) применом квантнохемијских прорачуна.

Прорачуни енергије интеракција комбиновани су са анализом молекулских електростатичких потенцијала (MEP) како би се боље разумела природа ових интеракција. Најјача интеракција предвиђена је за HTcO_4 -триптофан. Фенилаланин је испољио сличну снагу интеракције (минимум -9.49 kJ/mol), док је најслабија интеракција уочена код тирозина. Анализа електростатичких потенцијала потврдила је да ове $\text{C}-\text{H}\cdots\text{O}$ интеракције имају изразито електростатички карактер, при чему атоми кисеоника делују као акцептори водоникових веза. Резултати указују да положај водоникових атома у односу на супституенте на ароматичном прстену утиче на јачину интеракција.

Пертехнетатни анјон (TcO_4^-) широко се користи као радиоизотоп у нуклеарној медицини, посебно у радиофармацеутским препаратима за дијагностику различитих обољења. Истраживање његових нековалентних интеракција са биомолекулима, попут ароматичних аминокиселина, доприноси бољем разумевању његове стабилности у биолошким системима и може бити од значаја за развој нових радиофармацеутика са побољшаним својствима. Ова студија пружа нове увиде у нековалентне контакте између пертехнетске киселине и фрагмената аминокиселина. Добијени резултати могу допринети бољем разумевању стабилности пертехнетат-пептидних комплекса и њихових потенцијалних примена.

2. Високоенергетски материјали и стабилност експлозива

2.1. Утицај халогених супституената на детонационе особине

Рад А 2.4. (*J. Phys. Org. Chem.*, М22 категорија) бави се утицајем халогених супституената на детонациона својства динитронафталена са халогеним супституентима кроз комбинацију квантнохемијских прорачуна енергије дисоцијације везе (*Bond Dissociation Energy-BDE*) и анализе молекулских електростатичких потенцијала (MEP). Анализа MEP-а често се користи за процену осетљивости високоенергетских материја на детонацију, јер је познато да високе позитивне вредности електростатичког потенцијала у централним регионима молекула корелирају са повећаном осетљивошћу на детонацију. Добијени резултати показују да халогени супституенти утичу на детонациона својства проучаваних једињења на два начина. Први механизам је кроз просторни утицај на нитро ($-NO_2$) групе – нагибањем ових група долази до смањења стабилности одговарајућих C–N веза, што указује на већу осетљивост на детонацију. Други механизам је кроз електронски утицај халогених атома који модификују вредности електростатичког потенцијала у централним деловима молекулских површина, што додатно утиче на предикцију детонационих својстава. Ови резултати доприносе бољем разумевању утицаја супституената на особине високоенергетских материја и могу бити корисни у њиховом даљем рационалном дизајну.

2.2. Структурни фактори који утичу на стабилност експлозива (положј $-NO_2$ групе, полициклични системи)

Рад А 2.6. (М22 категорија), објављен у *RSC Advances*, представља проучавање утицаја величине ароматичног система на осетљивост високоенергетских молекула према детонацији, а реализован је у оквиру потпројектног задатка на CD-HEM пројекту под руководством др Иване Вељковић. Квантнохемијским прорачунима заснованим на DFT методи анализирани су вредности електростатичког потенцијала и енергије дисоцијације C– NO_2 веза у серији полицикличних нитроароматских молекула. Добијени резултати показали су да се повећањем величине ароматичног система смањују позитивне вредности електростатичког потенцијала у централним областима молекулских површина, што доводи до смањења осетљивости молекула на детонацију. Тако, вредности позитивног електростатичког потенцијала опадају од 1,2,4,5-тетранитробензена до 2,3,9,10-тетранитропентацена. Анализа MEP-а била је у складу са трендовима у енергијама дисоцијације C– NO_2 веза, где је показано да је ова веза слабија у мањим ароматичним системима

(нпр. 1,2,4,5-тетранитробензен у поређењу са 2,3,9,10-тетранитропентаценом). Такође, испитан је утицај међусобног распореда $-\text{NO}_2$ група на осетљивост нитроароматских молекула где се показало да суседне нитро-групе доводе до дестабилизације молекула и лакше детонације. Ови резултати су од великог значаја за дизајн нових класа високоенергетских материја са смањеном осетљивошћу на детонацију.

2.3. Дизајн високоенергетских материјала на бази комплекса прелазних метала коришћењем рачунарске предикције

Рад А 2.7., публикован у часопису *Molecules*, категорије M22, разматра дизајн и развој нових високоенергетских једињења на бази комплекса прелазних метала са смањеном осетљивошћу ка детонацији, али са високом ефикасношћу. У овом истраживању, употребљени су прорачуни засновани на теорији функционала густине (DFT) како би се проучавали бис(ацетилацетонато) и нитро-бис(ацетилацетонато) комплекси. Фокус је био на анализи електростатичког потенцијала ових молекула, са посебним освртом на вредности позитивног потенцијала у централним деловима површине молекула, који је показатељ осетљивости према детонацији. Резултати анализе показали су да нитро-бис(ацетилацетонато) комплекси бакра и цинка имају сличне вредности електростатског потенцијала у централним регијама као што је код конвенционалних експлозива попут TNT-а. Ова чињеница указује да се ова једињења могу користити као потенцијални високоенергетски материјали са задовољавајућом осетљивошћу и перформансама. Ови налази отварају могућности за развој нових енергетских материјала са контролисаном осетљивошћу, што је кључно за њихову безбедну примену.

2.4. Синтеза и карактеризација комплексних једињења прелазних метала ($\text{Co}(\text{AcAc}-\text{NO}_2)_3$)

У раду А 2.9. (часопис *Chemistry*, још увек није додељена М категорија) се истражује смањење осетљивости високоенергетских материјала према детонацији, што представља кључни циљ бројних теоријских и експерименталних студија. Познато је да позитиван електростатски потенцијал изнад централних региона површине молекула указује на високу осетљивост према детонацији високоенергетских молекула. Координациони комплекси нуде додатне структурне карактеристике које се могу користити за прилагођавање вредности електростатског потенцијала и осетљивости према детонацији ове класе једињења. Наиме, резултати указују на то да додатак хелатних прстенова може бити нови алат за контролу осетљивости координационих комплекса према детонацији. Увођењем хелирајућих лиганата у комплекс долази до повећања осетљивости једињења ка детонацији.

У овом истраживању, др Ивана Вељковић је комбиновала DFT са експерименталним подацима како би проценила високоенергетске особине тринитро-трис(ацетилацетонато) комплекса Cr(III), Mn(III), Fe(III) и Co(III). Анализа израчунатих вредности енергија дисоцијације (BDE) C-NO₂ везе и молекулских електростатичких потенцијала (MEP) показала је да ова једињења могу деловати као високоенергетски молекули. Др Вељковић је активно учествовала у експерименталном раду, синтези и анализи $\text{Co}(\text{AcAc}-\text{NO}_2)_3$ комплекса, као и у излагању овог комплекса отвореним пламеном, што је потврдило да се комплексна једињења овог типа заиста

понашају као високоенергетски материјали. Рачунарски приступ и методологија предикције да је $\text{Co}(\text{AcAc-NO}_2)_3$ комплекс потенцијално високоенергетско једињење потврђени су резултатима мерења, с обзиром на то да је топлота сагоревања за $\text{Co}(\text{AcAc-NO}_2)_3$ износила 14,133 J/g, што потврђује високе енергетске особине овог комплекса.

IV АНАЛИЗА ИЗАБРАНИХ ПЕТ НАЈЗНАЧАЈНИЈИХ НАУЧНИХ ОСТВАРЕЊА КАНДИДАТА ОД ПОСЛЕДЊЕГ ИЗБОРА У НАУЧНО ЗВАЊЕ

Пет најзначајнијих научних публикација др Иване Вељковић које су публиковане у периоду од избора у звање научни сарадник су означене у библиографији (листа А) као 2.1.–2.3., 2.5. и 2.6.

1. (2.1. – M21) I. Veljković, M. Malinić, D. Veljković, Evidence of strong O-H...C interactions involving apical pyramidal carbon atoms as hydrogen atom acceptors, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2025**, 27, 2563–2569; <https://doi.org/10.1039/D4CP03809F>

Овај рад пружа значајан допринос разумевању нетипичних водоничних веза, уводећи нови тип интеракције у којој угљеников атом на врху пирамидалне структуре има улогу акцептора водониковог атома из молекула воде. Квантохемијским прорачунима на високом нивоу теорије, по први пут је доказано да апикални угљеник може бити укључен у снажну привлачну O–H...C интеракцију, што представља неконвенционалну форму водоничне везе.

Др Ивана Вељковић је дала кључни допринос овом истраживању кроз прорачун енергија интеракције за различите модел системе, као и интерпретацију добијених резултата и анализу природе ових интеракција. Поред тога, учествовала је у анализи кристалних структура, чиме је додатно потврђено присуство ових интеракција у чврстом стању.

Представљени рад значајно доприноси проширењу постојећих сазнања о водоничним везама и отвара нове могућности у области молекулског дизајна.

Резултати су објављени у престижном међународном часопису *Physical Chemistry Chemical Physics*, категорије M21, што додатно потврђује оригиналност и научни значај овог истраживања.

2. (2.4. – M22) I. Veljković, A. Đunović, D. Veljković, Influence of halogen substituents on sensitivity towards detonation of polycyclic nitroaromatic high-energy molecules, *J. Phys. Org. Chem.*, **2024**, 3, e4649; <https://doi.org/10.1002/poc.4649>

Овај рад се бави утицајем халогених супституената на осетљивост полицикличних нитроароматичних високоенергетских молекула ка детонацији. Кроз комбинацију прорачуна енергије дисоцијације везе (BDE) и анализе молекулског електростатичког потенцијала (MEP), показано је да халогени супституенти утичу на детонациона својства деформацијом геометрије молекула и суседних -NO₂ група, што доводи до смањења стабилности C–N веза, чије раскидање представља иницијални корак ка детонацији експлозива. Поред тога, халогени супституенти модификују позитивне вредности електростатичког потенцијала у централним деловима површине молекула, чиме додатно утичу на осетљивост молекула.

Значај овог рада препознат је од стране уредништва међународног часописа *Journal of Physical Organic Chemistry*, категорије **M22**, које је одабрало **илустрацију из рада за насловну страну издања** у којем је рад објављен. Овај избор представља посебно признање за квалитет и оригиналност истраживања, с обзиром на то да се илустрације на насловним странама често бирају како би се истакли најзначајнији радови.

3. (2.5. – M22) D. Kretić, V. Medaković, I. Veljković, Interplay between energy and geometry of parallel-displaced interactions in S_8 dimer structures, *Comput. Theor. Chem.*, **2023**, 1230, 114381; <https://doi.org/10.1016/j.comptc.2023.114381>

У овом раду др Ивана Вељковић је била **аутор одговоран за кореспонденцију** и самостално реализовала комплетно истраживање, од почетне идеје до финалне анализе и писања рада. Истраживање је фокусирано на детаљну анализу нековалентних интеракција између молекула елементарног сумпора (S_8), најстабилнијег алотропа сумпора. Иако је α - S_8 модификација добро проучена, свеобухватна анализа природе, геометрије и енергије интеракција између S_8 прстенова до сада није била спроведена.

Др Вељковић је систематски анализирила све кристалне структуре из Кембричке базе структурних података које садрже контакте између S_8 молекула и комбиновала ове податке са квантохемијским прорачунима на високом нивоу теорије (CCSD(T)/CBS). Резултати су показали да је најстабилнија оријентација молекула у чврстом стању паралелно-смакнута геометрија, што показују и прорачуни енергије интеракције. Најстабилнија оријентација интерагујућих прстенова је управо паралелно-смакнута са енергијом интеракције од -8.70 kcal/mol. NCI анализа је открила значајно преклапање површина молекула у овој оријентацији, док је анализа декомпозиције енергије урађена SAPT методом указала да је доминантна привлачна сила дисперзиона компонента, уз значајан допринос електростатике.

Овај рад је публикован у међународном часопису *Computational and Theoretical Chemistry*, издавача Elsevier, чији је импакт фактор 3,0 (2023). Рад има посебан значај у научној каријери др Вељковић будући да је резултат њеног потпуно самосталног истраживачког ангажмана, и доприноси бољем разумевању молекулског организовања у чврстом сумпору, али и у другим системима где S_8 молекула игра кључну улогу.

4. (2.6. – M22) I. Veljković, J. Radovanović, D. Veljković, How aromatic system size affects the sensitivities of highly energetic molecules?, *RSC Adv.*, **2021**, 11, 31933–31940; <https://doi.org/10.1039/D1RA06482G>

Рад који је резултат ангажовања др Иване Вељковић као **руководиоца подпројектног задатка** у оквиру пројекта CD-HEM, финансираног од стране Фонда за науку Републике Србије (позив ПРОМИС) представља значајан допринос у области високоенергетских материја. Ауторка је спровела детаљну анализу утицаја величине ароматичног система на осетљивост полицикличних нитроароматичних молекула, комбинујући прорачуне електростатичког потенцијала (ESP) и енергије дисоцијације C–NO₂ веза (BDE). Овим истраживањем показано је да повећање величине ароматичног језгра доводи до смањења позитивних вредности електростатичког потенцијала и самим тим до смањења осетљивости молекула на детонацију. Овим радом је значајно допринела

разумевању односа између геометрије молекула, положаја нитро група и њихове осетљивости на детонацију. Резултати овог рада представљају важан корак ка развоју нових, стабилнијих високоенергетских материја.

5. (2.3.– M21) I. Veljković, D. Veljković, G. Sarić, I. Stanković, S. Zarić, What is the preferred geometry of sulfur–disulfide interactions?, *CrystEngComm*, **2020**, 22, 7262–7271; <https://doi.org/10.1039/DOCE00211A>

Овај рад представља значајан допринос докторској дисертацији др Иване Вељковић, објављен након одбране њене докторске дисертације. Др Вељковић је у оквиру овог истраживања **руководила и радом студенткиња** Гордане Сарић и Катарине Катанчевић, чији су завршни радови били усмерени на исту тему. Део резултата Гордане Сарић је укључен у овај заједнички рад. Др Вељковић је имала водећу улогу у осмишљавању и спровођењу истраживачких активности, као и у анализи података. Она је извршила детаљну статистичку анализу геометријских података о S–S контактима добијених из Кембричке базе структурних података, што је послужило као основа за даље квантнохемијске прорачуне у системима који садрже интеракцију између атома сумпора и дисулфидних фрагмената.

Резултати добијени кроз сложене квантнохемијске прорачуне потврдили су закључке из анализе кристалних структура, доприносећи бољем разумевању геометрије и енергетских аспеката нековалентних интеракција у овим системима. Значај наведеног рада огледа се у његовом доприносу области структурне кристалографије и истраживању нековалентних интеракција, што је додатно потврђено објављивањем у једном од водећих часописа **M21** категорије, *Crystal Engineering Communications*.

V. КВАЛИТАТИВНА ОЦЕНА НАУЧНОГ ДОПРИНОСА

1. Показатељи успеха у научном раду:

(Награде и признања за научни рад додељене од стране релевантних научних институција и друштава; уводна предавања на научним конференцијама и друга предавања по позиву; чланства у одборима међународних научних конференција; чланства у одборима научних друштава; чланства у уређивачким одборима часописа, уређивање монографија, рецензије научних радова и пројеката).

1.1. Награде и признања за научни рад додељене од стране релевантних научних институција и друштава

Током докторских студија, др Ивана Вељковић је била добитница престижне истраживачке стипендије Немачке академске службе за размену (DAAD), која јој је омогућила једногодишњи истраживачки боравак на Макс Планк институту за хемијску физику чврстог стања у Дрездену. У оквиру овог програма, радила је у групи др Horst Vormmann-а, под чијим менторством је реализовала пројекат *Bonding in polymorphs of [TTF][TCNE] complex: experimental and theoretical approach*. Истраживање је било усмерено на испитивање начина везивања у полиморфима

[TTF][TCNE] комплекса, познатог по својим изузетним проводним својствима због којих се често назива „органским металом“. Циљ пројекта био је да се кроз комбиновање експерименталних и теоријских метода детаљно анализирају интеракције у различитим полиморфима овог комплекса, уз посебан акценат на њихову стабилност. У оквиру пројекта прикупљени су подаци високе резолуције методом дифракције на кристалима. Добијене експерименталне и израчунате густине електрона анализирани су коришћењем Bader-овог *Atoms-in-Molecules* приступа. Теоријски део резултата овог истраживања објављен је у раду категорије M21a (рад Б 2.1.) што представља значајан допринос у области хемије материјала и кристалног инжењеринга. Ова стипендија и пројекат истичу се као један од највећих успеха у досадашњој научној каријери др Иване Вељковић, као и као потврда квалитета и релевантности њеног истраживачког рада.

Др Ивана Вељковић је добитница стипендије Међународне уније за кристалографију (IUCr) за учешће на XXV конференцији Српског кристалографског друштва. Ова стипендија представља значајно међународно признање и пружила је могућност да своје истраживачке резултате представи у оквиру радионице *Crystallographic methods, tools and possibilities*, коју је подржао IUCr. Као део овог програма, др Вељковић је представила резултате свог истраживања и том приликом учествовала је у дискусији са водећим светским кристалографима о примењеној методологији и потенцијалима нових техника.

Као знак признања за значајан допринос научном истраживању, један од радова др Иване Вељковић (А 2.4.) изабран је за насловну страну научног часописа *Journal of Physical Organic Chemistry*. Ово признање одражава научну релевантност и визуелну атрактивност истраживања, што доприноси његовој видљивости у стручној заједници.

Прилог 1. Докази о наградама

1.2. Рецензије научних радова

Др Ивана Вељковић је била ангажована као рецензент за истакнути међународни часопис *Inorganic Chemistry Communications* (ИФ: 4,4, издавач *Elsevier*), који представља једну од водећих платформи за објављивање радова из области неорганске, органометалне и супрамолекулске хемије. Позив за рецензију овог часописа сведочи о стручном препознавању њене експертизе и компетентности у области теоријске хемије. Поред тога, др. Вељковић је била рецензент за четири научна рада у часопису *Chemical Papers*. Овај часопис, који издаје *Springer*, објављује радове из области основне и примењене хемије и хемијског инжењерства, а њена улога као рецензента била је од важности за осигурање научне тачности и квалитета радова који се објављују у овом часопису. Потврде о успешно извршеним рецензијама приложене су у *Прилогу 2*.

Прилог 2. Доказ о рецензији научних радова

1.3. Уводна предавања на научним конференцијама и друга предавања по позиву

Комисија је анализирали учешће др Иване Вељковић на научним конференцијама и едукативним догађајима, посебно истичући њене усмене презентације које представљају значајан

облик научне комуникације. Др Вељковић је током своје каријере одржала неколико усмених презентација, чиме је потврдила своју способност да резултате истраживања представи на скуповима међународног и националног значаја. Предавање под називом „*Assessment of performance of density functionals by using statistical methods – the case of tetrathiafulvalene stacking*“, одржала је на 5. симпозијуму *Mathematics and Applications* (Б 4.7.). Као једини аутор саопштења „*Student Magazine POZITRON as a tool in education*“, одржала је усмено предавање на 2. научном симпозијуму *Theory and Practice of Science in Society: Challenges and Perspectives* (Б 3.3.). Ово излагање било је посвећено улози студентског магазина *ПОЗИТРОН* у образовању, при чему је истакнут значај научнопопуларног приступа у комуникацији науке и ангажовању младих у научноистраживачком раду.

Поред усмених излагања на конференцијама, др Вељковић је као један од предавача учествовала у едукативном програму намењеном студентима и младим истраживачима. У оквиру семинара и радионице „Нови приступи у дизајнирању експлозива“ организованих у склопу пројекта CD-HEM, финансираног од стране Фонда за науку Републике Србије, 2022. године одржала је предавање под називом „*Ароматични молекули као експлозиви*“. У овом предавању, др Вељковић је представила савремене приступе у разумевању и дизајнирању енергетских материјала заснованих на ароматичним једињењима.

Кроз ова излагања, др Вељковић је показала способност да резултате свог истраживања представи у виду усменог излагања што је кључно за пренос научног знања и ширење научних идеја.

2. Ангажованост у развоју услова за научни рад, образовању и формирању научних кадрова: (Допринос развоју науке у земљи; менторство при изради мастер, магистарских и докторских радова, руковођење специјалистичким радовима; педагошки рад; међународна сарадња; организација научних скупова).

2.1. Допринос развоју науке у земљи

Др Ивана Вељковић је од 2015. до 2019. године била ангажована на пројекту 172065 Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије под називом *Нековалентне интеракције π -система и њихова улога у молекулском препознавању* у оквиру којег се бавила проучавањем нековалентних интеракција у малим молекулима и протеинима применом квантнохемијских прорачуна високог нивоа и применом метода хемијске информатике. У периоду од 2020. до 2022. године др Вељковић је била ангажована на пројекту „*Рачунарско дизајнирање високоенергетских материјала: случај хелатних комплекса*“ (CD-HEM), финансираном од стране Фонда за науку Републике Србије у оквиру програма ПРОМИС (бр. гранта: 6066886). Као истраживач на овом пројекту, др Вељковић је дала значајан допринос развоју науке у земљи кроз примењене и фундаменталне студије високоенергетских материјала заснованих на хелатним комплексима. Њен рад је обухватао примену напредних квантнохемијских са циљем разумевања фактора који утичу на њихову осетљивост на детонацију.

Поред истраживања у оквиру рачунарске хемије, др Вељковић је учествовала и у синтези комплекса који је показао изразита својства високоенергетског материјала. Ови резултати су 2023. године представљени у раду А 2.9.

Резултати истраживања објављени у реномираним међународним часописима, укључујући и рад који је привукао пажњу научне заједнице а који је објављен на насловној страни часописа *Journal of Physical Organic Chemistry*, сведоче о значају овог пројекта. Ангажовање др Вељковић на овом пројекту унапредило је научно знање у области дизајна високоенергетских материјала и допринело јачању научно-истраживачког потенцијала у Србији кроз интеграцију теоријског приступа.

Др Ивана Вељковић је једна од оснивача програма „Отворене лабораторије“ на Универзитету у Београду - Хемијском факултету, иницијативе која више од 13 година доприноси популаризацији науке и развоју научне свести код младих ([OSNIVAČI - Otvorene laboratorije](#)). Овај програм усмерен је на приближавање хемије ученицима основних и средњих школа кроз интерактивне радионице и практичне експерименте у циљу унапређења њиховог знања и вештина. „Отворене лабораторије“ се могу похвалити импозантним резултатима – више од 17.000 ученика из целе Србије и неколико школа из Републике Северне Македоније прошло је кроз овај програм, стичући јединствено искуство рада у лабораторији под менторством студената. Посебна вредност програма лежи у његовој мисији да младима пружи прилику да истражују свет науке и развију критичко мишљење, али и да стекну свест о значају науке у очувању животне средине. Кључни партнер програма је глобална хемијска компанија BASF, са којом „Отворене лабораторије“ имају дугогодишњу успешну сарадњу на бројним пројектима који промовишу хемију и образовање са акцентом на одрживу будућност. Један од најзначајнијих пројеката је *Chemgeneration – ZeroWaste*, који младима кроз интерактивне радионице и експерименте указује на значај науке у стварању одрживог света. Такође, кроз програм „*Kids' Lab – Молекул је кул*“, ученици имају прилику да кроз креативне експерименте открију основне принципе хемије на забаван и едукативан начин. Захваљујући овим иницијативама, др Ивана Вељковић је дала значајан допринос развоју науке у земљи, активно радећи на инспирисању нових генерација младих истраживача и подстицању њиховог интересовања за науку и њену примену у решавању глобалних изазова.

У оквиру свог ангажмана на популаризацији науке, била је један од оснивача студентског часописа Хемијског факултета [ПОЗИТРОН](#), чији је уједно била и први главни и одговорни уредник у периоду од 2013. до 2018. године. Часопис је конципиран као платформа за научно-популарне чланке, са циљем приближавања хемије широј јавности, и подстицања интересовања за ову дисциплину. Часопис ПОЗИТРОН и његову улогу у популаризацији хемије представила је као аутор чланка у часопису *Хемијски преглед*, у издању Српског хемијског друштва (М53 категорије).

Др Вељковић је била један од координатора изложбе „[Лабораторија великана – наслеђе српске хемије](#)“ у Галерији науке и технике Српске академије науке и уметности (САНУ). Током трајања изложбе, била је ангажована и као кустос и учествовала је у презентацији поставке посетиоцима, доприносећи њеној успешној реализацији и популаризацији хемије.

На основу ангажовања др Иване Вељковић у бројним волонтерским и ваннаставним активностима, којима је дала значајан допринос развоју Универзитета у Београду – Хемијског факултета, додељена јој је Похвалница за допринос развоју факултета.

Прилог 2а. Доказ о координацији и кустоском ангажману на изложби и похвалница

2.2 Менторство при изради мастер, магистарских и докторских радова

Др Ивана Вељковић је активно учествовала у менторском раду кроз вођење завршних и мастер радова, као и кроз ангажман у комисијама за одбрану завршних и мастер радова. Руководила је израдом дипломских (завршних) радова студенткиња Гордане Сарић, Катарине Катанчевић, Сање Вујовић и Невене Улетиловић, као и мастер рада Гордане Сарић. Поред наведеног ангажмана, др Вељковић је била члан комисије за одбрану завршних радова студената Универзитета у Београду – Хемијског факултета: Зоране Зековић, Јелене Давидовић и Масаје Микија (Masaya Miki). Такође је учествовала у раду комисије за одбрану мастер радова студената Мирославке Малинић, Вање Шајатовић и Невене Улетиловић.

Прилог 3. Потврда о ангажовању у менторству и чланству у комисијама

2.3. Педагошки рад

У периоду од 2016. до 2019. године др Ивана Вељковић је била ангажована као сарадник у настави на Катедри за општу и неорганску хемију Универзитета у Београду – Хемијског факултета, на предметима Општа хемија за студенте прве године Биолошког факултета и Неорганска хемија 2 за студенте треће године Хемијског факултета. На основу анкете спроведене међу студентима који су похађали курс Неорганска хемија 2 (смер дипломирани хемичар), др Ивана Вељковић је остварила високе просечне оцене за свој педагошки рад (на скали од 1 до 5): 4,73 (летњи семестар 2016/17. године), 4,79 (летњи семестар 2017/18. године) и 5,00 (летњи семестар 2018/19. године), што указује на изузетан квалитет наставе и преданост у раду са студентима.

Прилог 4. Докази о педагошком раду

2.4. Међународна сарадња

Др Ивана Вељковић је као добитник DAAD стипендије провела годину дана (01. августа 2015. – 29. августа 2016.) на усавршавању на Макс Планк институту за хемијску физику чврстог стања у Дрездену, Немачка. Поред тога, била је учесник на пројекту билатералне сарадње између Србије и Француске за период 2018-2019. (Назив пројекта: Катјон/π интеракције између полицикличних ароматичних угљоводоника и јона прелазних метала; Евиденциони број пројекта: 451-03 01963/2017-09/11). Др Ивана Вељковић активно учествује у међународним научним сарадњама. Са колегом из Црне Горе објавила је заједнички рад (А 2.9.) који представља значајан допринос истраживању нековалентних интеракција ароматичних аминокиселина и резултат је успешне међународне сарадње. Поред тога, у сарадњи са колегама са Института „Стефан Јозеф“ у Љубљани (Словенија), др Вељковић је у својству руководиоца пројекта са српске стране поднела предлог пројекта „*Hydrogen-bond networks and their role of dissociation of water in rutile-rutile*

interfaces” у оквиру билатералне сарадње за период 2025–2027. Пројекат је још увек у фази евалуације а резултати конкурса за овај пројекат још увек нису објављени.

Прилог 5. Докази о међународној сарадњи

2.5. Организација научних скупова

Др Ивана Вељковић активно учествује у организацији научних скупова, са циљем унапређења научне сарадње и промоције истраживачких резултата. Била је чланица организационог одбора 24. Конференције Српског кристалографског друштва која је била одржана 2017. године у Вршцу. Поред тога, чланица је тима задуженог за организацију предстојеће 30. Конференције Српског кристалографског друштва, која ће по први пут бити међународног карактера. Овај јубиларни догађај има за циљ да окупи истакнуте кристалографе из земље и иностранства, подстичући размену знања и унапређење научне сарадње на глобалном нивоу. Поред тога, др Вељковић је учествовала у организацији друге интерне конференције Института за хемију, технологију и металургију под називом Корак у искорак 2024, која је окупила истраживаче са ИХТМ-а са циљем представљања најновијих научних резултата и текућих пројеката. Ова конференција пружила је платформу за размену идеја и иницирање будућих сарадњи међу различитим истраживачким групама. Овакви научни скупови додатно наглашавају важност примене истраживања у решавању практичних изазова и подстицању иновација у индустрији.

Прилог 6. Доказ о организацији научних скупова

3. Организација научног рада:

(Руковођење пројектима, потпројектима и задацима; технолошки пројекти, патенти, иновације и резултати примењени у пракси; руковођење научним и стручним друштвима; значајне активности у комисијама и телима министарства надлежног за послове науке и технолошког развоја и другим телима везаних за научну делатност; руковођење научним институцијама).

3.1. Руковођење пројектима, потпројектима и задацима

Др Ивана Вељковић је у оквиру пројекта „*Рачунарско дизајнирање високоенергетских материјала: случај хелатних комплекса (CD-HEM)*” самостално руководила подпројектним задатком „Утицај величине ароматичних система на осетљивост високоенергетских молекула“. Њен рад је обухватио детаљне квантохемијске анализе којима је истраживана корелација између величине ароматичних система и њихове осетљивости на детонацију. Руководећи овим задатком, др Вељковић је показала висок ниво стручности и самосталности, водећи истраживања од почетне идеје до финалне публикације. Резултати њеног рада објављени су у научном часопису М22 (А 2.6.), што представља значајан допринос развоју науке у области високоенергетских материјала.

Прилог 7. Доказ о руковођењу подпројектним задацима

4. Квалитет научних резултата:

(Утицајност; параметри квалитета часописа и позитивна цитираност кандидатових радова; ефективни број радова и број радова нормиран на основу броја коаутора; степен самосталности и степен учешћа у реализацији радова у научним центрима у земљи и иностранству; допринос кандидата реализацији коауторских радова; значај радова).

4.1. Утицајност

Утицајност и научни допринос др Иване Вељковић огледа се у квалитету објављених радова. Др Ивана Вељковић је до сада објавила укупно тринаест научних радова. Два научна рада су објављена у међународним часописима изузетних вредности (**M21a**: *Acta Cryst. B*, ИФ₂₀₁₈: 6,732 и *Cryst.Growth Des.* ИФ₂₀₁₄: 4,891), четири рада у врхунским међународним часописима (**M21**: *CrystEngComm*, ИФ₂₀₁₆: 3,474; *CrystEngComm*, ИФ₂₀₂₀: 3,545; *CrystEngComm*, ИФ₂₀₂₁: 3,756; и *Phys. Chem. Chem. Phys.* ИФ₂₀₂₃: 2,9), пет радова у истакнутим међународним часописима (**M22**: *J. Mol. Model.* ИФ₂₀₁₆: 1,425; *Molecules* ИФ₂₀₂₁: 4,927; *RSC Adv.* ИФ₂₀₂₁: 4,036; *Comput. Theor. Chem.* ИФ₂₀₂₃: 3,0; и *J. Phys. Org. Chem.* ИФ₂₀₂₃: 1,9) као и један рад у међународном часопису (**M23**: *J. Serb. Chem. Soc.* ИФ₂₀₂₃: 1,0). Осим тога, коаутор је на раду у часопису *Chemistry* (ИФ₂₀₂₃: 2,4) којем још није додељена М категорија. Коаутор је једног поглавља у књизи (M14), дванаест саопштења са скупова међународног значаја штампаних у изводу (M34), једног саопштења на скупу међународног значаја штампаног у целини (M33) и 24 саопштења са скупова националног значаја штампаних у изводу (M64). Од укупно 12 радова који су објављени у међународним часописима са SCI листе, др Ивана Вељковић је први аутор на седам (два рада M21a, три M21 и два M22 категорије) и аутор за кореспонденцију на једном раду (M22).

Од предходног избора у звање, др Ивана Вељковић је објавила девет научних радова. Од тог броја, три рада су објављена у врхунским међународним часописима (**M21**): *Phys. Chem. Chem. Phys.* (ИФ₂₀₂₃: 2,9), *CrystEngComm* (ИФ₂₀₂₁: 3,756) и *CrystEngComm* (ИФ₂₀₂₀: 3,545). Четири рада су објављена у истакнутим међународним часописима (**M22**): *J. Phys. Org. Chem.* (ИФ₂₀₂₃: 1,9), *Comput. Theor. Chem.* (ИФ₂₀₂₃: 3,0), *RSC Adv.* (ИФ₂₀₂₁: 4,036) и *Molecules* (ИФ₂₀₂₁: 4,927), један рад у међународном часопису (**M23**): *J. Serb. Chem. Soc.* (ИФ₂₀₂₃: 1,0) и један рад у међународном часопису којем још није додељена М категорија: *Chemistry* (ИФ₂₀₂₃: 2,4). Уз то, др Вељковић је учествовала на седам међународних конференција на којима је имала један рад саопштен на скупу међународног значаја, штампан у целини (M33) и шест саопштења M34 категорије. У периоду од предходног избора у звање др Ивана Вељковић је била коаутор 16 радова саопштених на скупу националног значаја, штампаних у целини (M64).

4.2. Параметри квалитета часописа и позитивна цитираност

Параметри квалитета часописа у којима су објављени радови др Иване Вељковић приказан је у библиографији кроз позицију часописа у оквиру одређене научне области (за годину публикавања или претходне две године), као и кроз импакт фактор. Укупан збир импакт фактора свих објављених радова у којима је кандидат коаутор је 43,986. Збирни импакт фактор свих објављених радова након последњег избора у звање је 27,464 укључујући рад без М категорије. Цитираност

радова је приказана у *Прилогу 8* и према *Scopus* бази података износи **105** (94 без аутоцитата) на дан 22. 03. 2024. Вредност h-индекса је 5 (4 када се изузму аутоцитати.)

Напомена: На *Scopus* профилу др Иване Вељковић (Scopus ID: 57103239100) не налазе се сви радови услед техничког пропуста, јер је због промене презимена дошло до замене са другим аутором са истим именом и презименом. Иако је др Ивана Вељковић више пута упутила пријаву *Scopus* канцеларији и радови су враћени на њен профил, ова грешка се поново јавља са свим новим радовима. Сви научни радови др Иване Вељковић доступни су на ORCID платформи, под бројем [0000-0003-0584-4053](https://orcid.org/0000-0003-0584-4053).

Прилог 8. Цитираност радова (без самоцитата) према Scopus бази података

4.3. Ефективни број радова и број радова нормиран на основу броја коаутора

На свим радовима категорије M20 категорије на којима је др Ивана Вељковић коаутор, а на основу критеријума који су наведени у *Правилнику о стицању истраживачких и научних звања*, има мање од 5 коаутора те стога не подлежу нормирању. Са друге стране, следећи радови су подлегли нормирању због броја коаутора: радови саопштени на скупу међународног значаја, штампани у изводу (M34 категорија) – А 3.4. (11 коаутора), А 3.5. (6 коаутора) и А 3.6. (11 коаутора), као и радови саопштени на скупу националног значаја, штампани у целини (M64 категорија) – А 4.16. (6 коаутора) и Б 4.2. (6 коаутора). Ови радови су нормирани у складу са наведеним критеријумима што је јасно назначено у библиографији.

4.4. Степен самосталности и степен учешћа у реализацији радова у научним центрима у земљи и иностранству

У свом научно-истраживачком раду др Ивана Вељковић је показала изузетан степен самосталности, како у извођењу прорачуна и анализи података добијених из кристалних структура, тако и у обради података и писању публикација. Др Ивана Вељковић је први аутор на седам од 12 радова (два рада M21a, три M21 и два M22 категорије) што је 58,33% укупног броја радова кандидата. Поред тога, треба истаћи да је др Вељковић аутор одговоран за кореспонденцију на једном раду M22 категорије, који је објављен у истакнутом часопису *Computational and Theoretical Chemistry* (Elsevier, ИФ₂₀₂₃: 3,0). Овај рад, као и остали наведени радови, одражава њену самосталност, иницијативу и лидерску улогу у научно-истраживачким процесима, као и способност за рад у тиму, што је посебно важно за стручну заједницу.

Др Ивана Вељковић остварила је сарадњу са више истраживачких центара у земљи и иностранству. У Србији, сарађује са Институтом за нуклеарне науке „Винча“ а из те сарадње је објавила заједнички рад (А 2.6.) са Јеленом Радовановић, истраживачем приправником тог института. Такође, сарађује са др Јеленом Петровић из Центра за нуклеарну медицину са позитронском емисионом томографијом, Универзитетског клиничког центра Србије и Медицинског факултета Универзитета у Београду са којом је објавила рад у међународном

часопису (А 2.8.) о интеракцији пертехницијумове киселине са арматичним аминокиселинама што пружа боље разумевање стабилности комплекса пертехнетата и пептида.

На међународном нивоу, остварила је значајну сарадњу са проф. др Michael B. Hall-ом са Департмана за хемију, Texas A&M University, College Station, Texas, USA, са којим је објавила два рада (Б 2.1. и Б 2.3.). Сарађивала је и са проф. др Миљаном Биговићем са Природно-математичког факултета Универзитета Црне Горе у Подгорици (заједнички рад Б 2.8.). Поред тога, током боравка на Макс Планк институту за хемију чврстог стања у Дрездену (Немачка) као стипендиста DAAD фондације, остварила је сарадњу са др Horst Vormmann-ом. У оквиру билатералне сарадње са Француском, учествовала је и у заједничком пројекту са др Tzonka Mineva са Института Шарл Герар Монпеље (Institut Charles Gerhardt Montpellier) у Француској. Др Ивана Вељковић је остварила сарадњу са др Александером Речником и др Весном Рибић из Института Стефан Јозеф у Љубљани, јер је као руководилац пројекта са српске стране учествовала у припреми предлога пројекта у оквиру билатералне сарадње Републике Србије са Републиком Словенијом, за период 2025–2027.

4.5. Допринос кандидата реализацији коауторских радова

У свим радовима кандидат је активно учествовао, при чему је акценат био на различитим фазама рада: планирање анализе кристалних структура, формулисање модел система за квантохемијске прорачуне, планирање увођења нових параметара у анализу с циљем добијања јаснијег увида у резултате и потврде добијених закључака, дискусија резултата и само писање рада. Од претходног избора у звање др Ивана Вељковић је била први аутор на 62,5% објављених радова категорије М20 (А 2.1. – А 2.4; А 2.6) и аутор задужен за кореспонденцију на једном раду (А 2.5.). У овим радовима учествовала је у развоју основне идеје, спровођењу прорачуна и интерпретацији резултата, писању и припреми рукописа, комуникације са рецензентима и кореспонденције са часописима.

Др Ивана Вељковић је допринела публикованим коауторским радовима кроз примену своје експертизе у области рачунарске хемије, нековалентних интеракција и структурне кристалографије (А 2.1. А 2.3., А 2.5., А 2.8., А 3.1., А 3.2., А 3.4., А 3.6. А 3.7., А 4.3. – А 4.7., Б 2.4.). Њен рад обухватао је детаљно проучавање нековалентних интеракција у кристалним структурама малих молекула коришћењем података из релевантних база са циљем бољег разумевања супрамолекулских система, паковања молекула у чврстом стању и енергија њихове међусобне интеракције (Б 1.2., Б 2.1 – Б 2.3., Б 3.1, Б 3.4. – Б 3.6., Б 4.1. – Б 4.8.). Кроз квантохемијске прорачуне високог нивоа теорије, др Вељковић је допринела разумевању електронске структуре молекула, посебно у области високоенергетских материјала (А 2.4., А 2.6., А 2.7., А 2.9., А 3.2, А 3.3. А 3.4., А 3.5., А 3.7., А 4.1., А 4.8. – А 4.16). Њен рад се фокусирао на предикцију својстава хелатних комплекса прелазних метала као потенцијалних високоенергетских материјала, анализом мапа електростатичких потенцијала и вредности енергије дисоцијације веза (BDE). Активно је учествовала у дискусијама везаним за комбиновање ова два параметра добијена рачунарским методама а у којима су се изводиле смернице за синтезу комплекса са модификованом осетљивошћу на детонацију. Иако се др Вељковић превасходно бави теоријском хемијом, њен допринос овом истраживању обухвата и експериментални рад на синтези и карактеризацији комплекса. Овај експериментални рад укључује коришћење УВ спектрофотометра који је

обезбеђен у оквиру CD-HEM пројекта, чиме је значајно допринела комплексном разумевању и верификацији теоријских резултата. Све наведено је резултирало успешном синтезом одговарајућег комплекса и публикавањем добијених резултата (А 2.9.).

Др Ивана Вељковић је активно укључена у унапређење наставе хемије кроз развој и примену савремених метода и алата у едукацији. Њен рад обухвата коришћење рачунарских програма за поједностављено разумевање комплексних хемијских концепата, као и примену иновативних приступа у настави са циљем приближавања хемије студентима (А 4.2. и Б 3.2.). Поред тога, учествовала је у иницијативама које промовишу креативне едукативне садржаје, као што је часопис студената Хемијског факултета Позитрон, који служи као платформа за развој научног мишљења и популаризацију науке међу младима (Б 3.3.) а др Вељковић је један од оснивача и прва главна и одговорна уредница овог часописа (2013 – 2018).

Као што је већ и наведено, у оквиру својих радова, др Вељковић је активно учествовала у интерпретацији резултата, формулисању закључака и писању научних радова. Њен допринос обухватао је и иницирање научних идеја, анализу сложених података и креативан приступ решавању истраживачких изазова, што је значајно допринело квалитету и научној релевантности објављених радова. Резултате својих истраживања је презентовала на међународним и домаћим конференцијама у виду предавања или постерских саопштења.

4.6. Значај радова

Публиковани радови др Иване Вељковић представљају оригиналан научни допринос испитивању нековалентних интеракција, с посебним акцентом на нековалентне интеракције сумпора. Њена истраживања су допринела бољем разумевању природе и геометрије S...S интеракција, при чему је утврђено да ове интеракције у кристалним системима углавном поседују паралелно-смакнуту геометрију. Корелација података добијених анализом кристалних структура са резултатима квантохемијских прорачуна омогућила је дубље разумевање електронских и геометријских фактора који утичу на стабилност ових интеракција. Ови значајни закључци презентовани су у два рада Б 2.1. и Б 2.2. категорије M21a. Поред истраживања интеракција сумпора, значајан део рада др Вељковић обухвата и проучавање високоенергетских материјала, са посебним фокусом на хелатне комплексе прелазних метала. Кроз предикцију својстава ових комплекса на основу електростатичких мапа и BDE вредности, остварен је напредак у дизајнирању нових високоенергетских материјала са контролисаном осетљивошћу на детонацију, што је резултирало и практичном синтезом комплекса.

Радови др Вељковић објављени су у водећим међународним часописима који имају висок фактор утицајности, што додатно потврђује значај и научну релевантност њеног рада.

VI ИСПУЊЕНОСТ УСЛОВА ЗА СТИЦАЊЕ ПРЕДЛОЖЕНОГ НАУЧНОГ ЗВАЊА НА ОСНОВУ КОЕФИЦИЈЕНТА М

За природно-математичке и медицинске науке

| Диференцијални услов – од првог избора у претходно звање до избора у звање виши научни сарадник | Неопходно | Остварено |
|--|-----------|--------------|
| Укупно | 50 | 53,55 |
| Обавезни 1: М10+М20+М31+М32+М33+М41+М42 | 40 | 48,00 |
| Обавезни 2: М11+М12+М21+М22+М23 | 30 | 47,00 |

VII ОЦЕНА КОМИСИЈЕ О НАУЧНОМ ДОПРИНОСУ КАНДИДАТА, СА ОБРАЗЛОЖЕЊЕМ

Након увида у приложену документацију и анализе научно-истраживачких резултата који су документовани прилозима и пропратним материјалом, Комисија закључује да је др Ивана Вељковић, доктор хемијских наука, научни сарадник Универзитета у Београду – Института за хемију, технологију и металургију – Института од националног значаја за Републику Србију својим научно-истраживачким радом дала значајан допринос научној области којом се бави и да испуњава све услове за избор у звање виши научни сарадник, дефинисане важећим *Законом о науци и истраживањима* („Сл. Гласник РС“, бр 49/2019) и *Правилником о стицању научних и истраживачких звања* („Сл. Гласник РС“, бр 159/2020 и 14/2023).

Др Ивана Вељковић је до сада објавила 12 радова у часописима категорије М20 (од тога два категорије М21а, четири категорије М21, пет категорије М22, 1 категорије М23). Поред тога, коаутор је на раду у часопису којем још није додељена М категорија. Кандидаткиња је коаутор поглавља у монографији међународног значаја (М14). Резултате свог научноистраживачког рада је презентовала у виду бројних саопштења и то 12 саопштења са скупова међународног значаја штампаних у изводу (М34), једног саопштења на скупу међународног значаја штампаног у целини (М33) и 24 саопштења са скупова националног значаја штампаних у изводу (М64) што је укупно 37 усмених и постер презентација на домаћим и међународним конференцијама. Укупан број свих нормираних М бодова остварених током научно-истраживачког рада кандидата износи 94,04, док је укупан импакт фактор 43,986.

Након избора у звање научни сарадник, др Ивана Вељковић је публиковала 9 радова у међународним часописима (3 категорије М21, 4 категорије М22 и 1 категорије М23), и један рад у међународном часопису којем још није додељена М категорија. Уз то, др Вељковић је учествовала на седам међународних конференција на којима је имала један рад саопштен на скупу међународног значаја, штампан у целини (М33) и шест саопштења М34 категорије. У периоду од

предходног избора у звање др Ивана Вељковић је била коаутор 16 радова саопштених на скупу националног значаја, штампаних у целини (M64).

Квантификована вредност резултата остварена у овом периоду, исказана нормираним бројем М бодова, износи 53,55, док је за избор у звање виши научни сарадник, за област природно-математичких и медицинских наука, минималан потребни услов 50 бодова. Додатни квантитативни услови предвиђени Правилником такође су испуњени: Обавезни (1) остварено 48 (потребно 40) и Обавезни (2) остварено 47 (потребно 30).

На основу остварених резултата можемо закључити да је др Ивана Вељковић испунила све квантитативне захтеве потребне за избор у звање **виши научни сарадник**. Резултати научно-истраживачког рада др Иване Вељковић верификовани су испуњењем квалитативних критеријума предвиђених Правилником.

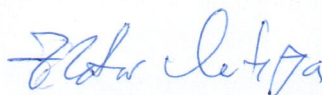
Увидом у базу података Scopus, укупна цитираност др Иване Вељковић износи 94 без аутоцитата, док је Хиршов индекс 4. Укупан фактор утицајности (ИФ) часописа у којима је кандидат публиковао све радове износи 43,986, а од избора у претходно звање 25,064.

Др Ивана Вељковић је активно учествовала у реализацији више пројеката. Радилa је на пројекту основних истраживања под називом „Нековалентне интеракције π -система и њихова улога у молекулском препознавању“ (172065) финансираног од стране Министарства науке Републике Србије. Била је члан пројектог тима ТЕМПУС пројекта „*Modernisation of Post-Graduate Studies in Chemistry and Chemistry Related Programmes*“ (JP 511044-2010). Др Вељковић је учествовала у пројекту Фонда за науку Србије, у оквиру позива ПРОМИС, под називом „Рачунарско дизајнирање високоенергетских материјала: случај хелатних комплекса“. У оквиру тог пројекта, самостално је руководила подпројектним задатком под називом: „Утицај величине ароматичних система на осетљивост високоенергетских молекула“. Поред тога, учествовала је у билатералном пројекту са Француском, који је био усмерен на проучавање катјон/ π интеракција између полицикличних ароматичних угљоводоника и јона прелазних метала.

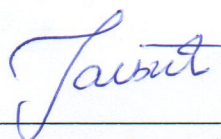
Кандидаткиња је током свог досадашњег научног ангажмана показала иницијативу у међународној сарадњи. Као добитница престижне стипендије Немачке академске службе за размену DAAD, провела је годину дана на Макс Планк институту за хемијску физику чврстог стања у Дрездену, где је усавршавала своје истраживачке вештине у области кристалографије и рендгенске структурне анализе. Др Ивана Вељковић активно учествује у организацији научних скупова, са циљем унапређења научне сарадње и промоције истраживачких резултата.

Поред свог доприноса науци, кандидаткиња је била ангажована и у педагошком раду. Учествовала је у извођењу експерименталних вежби на Хемијском факултету из предмета Општа хемија за студенте Биолошког факултета и Неорганска хемија 2 за студенте Хемијског факултета. Др Ивана Вељковић је активно учествовала у менторском раду, водећи завршне и мастер радове, као и ангажовањем у комисијама за одбрану. Др Ивана Вељковић је једна од оснивача програма „Отворене лабораторије“ на Универзитету у Београду - Хемијском факултету, иницијативе која више од 13 година доприноси популаризацији науке и развоју научне свести код младих. Овај програм усмерен је на приближавање хемије ученицима основних и средњих школа кроз интерактивне радионице и практичне експерименте у циљу унапређења њиховог знања и вештина.

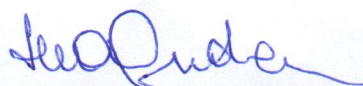
На основу увида у приложену документацију, разматрања и анализе постигнутих резултата у научно-истраживачком раду др Иване Вељковић, доктора хемијских наука, Комисија је установила да кандидаткиња испуњава све формалне и суштинске, квантитативне и квалитативне услове неопходне за избор у звање **виши научни сарадник**. Стога, Комисија **предлаже** Научном већу Универзитета у Београду – Института за хемију, технологију и металургију – Института од националног значаја за Републику Србију да прихвати овај извештај и утврди предлог за избор **др Иване Вељковић**, доктора хемијских наука, у звање виши научни сарадник и упути надлежним телима Министарства науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије у даљу процедуру.



др Матија Златар, научни саветник, *председник Комисије*
Универзитет у Београду – Институт за хемију, технологију и металургију – Институт од националног
значаја за Републику Србију



др Горан Јањић, научни саветник, *члан Комисије*
Универзитет у Београду – Институт за хемију, технологију и металургију – Институт од националног
значаја за Републику Србију



проф. др Маја Груден, редовни професор, *члан Комисије*
Универзитет у Београду – Хемијски факултет

У Београду,

27. 3. 2025. године