

Универзитет у Београду
ХЕМИЈСКИ ФАКУЛТЕТ

ПРИМЉЕНО: 15-12-2025

Орг. јед.	Број	Прилог	Вредност
	875/3		

**НАСТАВНО-НАУЧНОМ ВЕЋУ
УНИВЕРЗИТЕТ У БЕОГРАДУ – ХЕМИЈСКИ ФАКУЛТЕТ**

Извештај комисије за избор др Александре Б. Ђуновић у звање научни сарадник

На редовној седници Наставно-научног већа Универзитета у Београду – Хемијског факултета одржаној 11. 12. 2025. године, покренут је поступак за избор **др Александре Б. Ђуновић**, у звање научни сарадник (одлука број 875/2). На истој седници именовани смо за чланове Комисије за оцену резултата научно-истраживачког рада кандидата.

На основу анализе достављене и прикупљене документације и увида у научноистраживачки рад др Александре Б. Ђуновић, а сагласни Закону о науци и истраживањима (Службени гласник РС, бр. 49/2019) и Правилнику о стицању истраживачких и научних звања (Службени гласник РС, бр. 80/2024 и бр. 70/2025), као и члановима 105. и 111. Статута Универзитета у Београду – Хемијског факултета, подносимо следећи

ИЗВЕШТАЈ

1. ПОДАЦИ О КАНДИДАТУ

Име и презиме: Александра Б. Ђуновић

Година рођења: 17. 1. 1995.

Радни статус: запослена

Назив институције у којој је запослен: Иновациони центар Хемијског факултета у Београду д.о.о.

Претходна запослења: истраживач-приправник Иновациони центар Хемијског факултета у Београду д.о.о.

Образовање:

Основне академске студије: 2014 – 2018; Универзитет у Београду – Хемијски факултет

Одбрањен дипломски рад: 29. 6. 2018. године, Универзитет у Београду – Хемијски факултет

Одбрањен мастер рад: 5. 7. 2019. године, Универзитет у Београду – Хемијски факултет

Одбрањена докторска дисертација: 4. 12. 2025. године, Универзитет у Београду – Хемијски факултет

Постојеће научно звање: истраживач-сарадник

Научно звање за које се подноси захтев: научни сарадник

Датуми избора, односно реизбора у стечена научна звања (укључујући и постојеће)

Истраживач-приправник: 14. 11. 2019. године

Истраживач-сарадник: 10. 11. 2022. године

Област науке у којој се тражи звање: Природно – математичке науке

Грана науке у којој се тражи звање: Хемија

Научна дисциплина у којој се тражи звање: Општа и неорганска хемија

Назив матичног научног одбора којем се захтев упућује: Матични одбор за хемијске науке

Стручна биографија

Александра Б. Ђуновић је рођена 17. јануара 1995. године у Ужицу где је завршила основну и средњу школу. Хемијски факултет Универзитета у Београду, студијски програм Хемија уписала је 2014. године. Од септембра 2017. године волонтирала је у истраживачкој групи која се бави рачунарском хемијом под менторством др Душана Вељковића. Основне академске студије завршила је 2018. године са просечном оценом 9,14. Завршни рад „Теоријско проучавање X-H...Pt интеракција молекула *cis*- и *trans*-диамминдихлороплатине (II)“ одбранила је 2018. године при катедри за општу и неорганску хемију са оценом 10. Мастер академске студије на Хемијском факултету Универзитета у Београду, студијски програм Хемија је уписала исте године, а завршила 2019. године са просечном оценом 10,00. Завршни рад „Теоријско проучавање енергија и геометрија интеракција између комплекса $[\text{Ir}(\text{acac})(\text{CO})_2]$ и полицикличних ароматичних угљоводоника“ одбранила је 2019. године при катедри за општу и неорганску хемију са оценом 10. Докторске академске студије, студијски програм Хемија уписала је 2019. године, а завршила 2025. године са просечном оценом 10,00. Докторску дисертацију под називом „Квантохемијско и кристалографско проучавање утицаја халогених супституената на детонабилност нитроароматичних експлозива“ одбранила је 2025. године при катедри за општу и неорганску хемију под менторством др Душана Вељковића, са оценом 10. Од 2021. до 2022. године била је запослена као истраживач-приправник, а од 2022. као истраживач-сарадник Иновационог центра Хемијског факултета у Београду д.о.о. Као сарадник у настави била је ангажована за извођење вежби на више курсева на Хемијском факултету за студенте Хемијског и Биолошког факултета. Од 2023. године члан је извршног одбора Клуба младих хемичара.

2. ПРЕГЛЕД НАУЧНЕ АКТИВНОСТИ

Александра Б. Ђуновић се бави научноистраживачким радом из области Опште и неорганске хемије (рачунарска хемија). Њен научноистраживачки рад обухвата испитивање детонабилности потенцијалних високоенергетских нитроароматичних једињења са халогеним супституентима коришћењем квантохемијских и кристалографских метода. Анализа детонационих карактеристика се заснива превасходно на проучавању мапа електростатичких потенцијала молекула и енергија дисоцијације најслабије хемијске везе. Поред овога, кандидаткиња се бави квантохемијским и кристалографским проучавањем енергија и геометрија нековалентних интеракција, посебно испитивањем интеракција X-H/ Pt типа ($X = \text{O}, \text{N}, \text{S}$) као и нековалентних интеракција у којима учествују хелатна координациона једињења.

3. ПРИКАЗ НАЈЗНАЧАЈНИЈИХ РЕЗУЛТАТА

1. **Đunović A. B.**, Veljković D. Ž, Halogen bonds as a tool in the design of high energetic materials: evidence from crystal structures and quantum chemical calculations, *CrystEngComm*, 23, (2021), 6915 – 6922.

<https://doi.org/10.1039/D1CE00854D>

У овом раду је испитиван утицај халогених интеракција на промену електростатичког потенцијала изнад централне регије молекулске површи нитроароматичних високоенергетских молекула који у свом саставу имају халогене супституенте. Рачунате су и анализиране мапе електростатичког потенцијала јер се оне могу користити као један од индикатора детонабилности молекула. Познато је да позитиван потенцијал изнад централне регије молекулске површи указује на повећану детонабилност високоенергетских молекула. У датом раду најпре је урађена претрага Кембричке базе структурних података при чему су издвојене кристалне структуре које садрже нитроароматичне молекуле са халогеним атомима као супституентима и који учествују у халогеном везивању. Анализирани су добијени резултати, те су пронађене вредности растојања, валенционих и торзионих углова који се јављају у кристалним структурама приликом формирања халогених интеракција. Урађена је и анализа геометријских параметара фрагмената одабраних кристалних структура. Како би се добиле информације о нековалентним интеракцијама које постоје у посматраним фрагментима, урађена је анализа индекса нековалентних интеракција и израчунате су Хиршфелдове површи за мономере кристалних структура. Рачунате су и мапе електростатичког потенцијала за мономере и димере поменутих кристалних структура. Поређењем добијених вредности је утврђено да приликом формирања димера долази до промене електростатичког потенцијала изнад централних регија молекулске површи у односу на вредности изнад мономера у истој регији. Испитивани су дизајнирани модел системи са циљем да се минимализује утицај других интеракција које би могле да имају утицај на посматрану промену вредности потенцијала, као што је то случај у испитиваним реалним системима. У ту сврху је коришћен систем пикрил-бромид/хлороводоник. Разматрана су три модел система. У првом, равни у којима леже хлороводоник и пикрил-бромид заклапају угао од 90°. Систем је дизајниран тако да бром са пикрил-бромида интерагује преко своје регије позитивног потенцијала, односно представља акцептор електронске густине у халогеној интеракцији (модел систем А). У другом модел систему угао између равни у којима леже хлороводоник и пикрил-бромид је остао исти, али су замењене донорско-акцепторске улоге. Пикрил-бромид је преко атома брома био донор електронске густине у халогеној интеракцији, док је хлор из хлороводоника био акцептор (модел систем С). Разматран је и један посебан модел систем у којем хлор из хлороводоника и бром из пикрил-бромида интерагују преко својих регија позитивног потенцијала. У литератури је оваква врста халогених интеракција позната као „контраинтуитивна“ (модел систем В). Са циљем проналажења најстабилнијег стања, рачунате су интеракције за сваки од поменутих модел система за растојања између халогена 3 – 5 Å. Прорачуни су рађени најпре MP2 методом, док су детаљнији рађени CCSD(T) методом која се сматра једном од најтачнијих метода у рачунаркој хемији. Добијена су добра слагања резултата. Урађена је и оптимизација испитиваних система. Израчуната је мапа електростатичког потенцијала за молекул пикрил-бромида, те за модел системе А и С. Модел систем В није разматран јер је претпостављен мањи утицај електростатичке компоненте на стабилизацију овог модел система. Према добијеним резултатима, формирање халогених интеракција утиче на промену вредности потенцијала изнад централних

регија молекулских површи. Могло се закључити да се халогене интеракције могу користити за фина подешавања потенцијала у поменутим регијама високоенергетских материјала и као такве користити при синтези неких нових умерено детонабилних високоенергетских материјала.

Др Александра Б. Ђуновић је учествовала у анализи резултата добијених претрагом Кембричке базе структурних података. Рачунала мапе електростатичког потенцијала за мономере и димере фрагмената одабраних кристалних субструктура. Рачунала је енергије интеракција у свим дизајнираним модел системима и мапе електростатичког потенцијала за пикрил-бромид и модел системе А и С у најстабилнијим стањима. Учествовала је у анализи добијених резултата, као и припреми и писању рада.

4. ПОКАЗАТЕЉИ УСПЕХА У НАУЧНОИСТРАЖИВАЧКОМ РАДУ

4.1. Утицајност

Збир фактора утицаја (*impact factor*) часописа у којима су радови кандидата објављени је 14,69. Према *Scopus* индексној бази података на дан 13. 12. 2025. године, укупна цитираност радова је 18 (без аутоцитата), а *h* индекс је 3.

4.2. Међународна научна сарадња

Нема.

4.3. Руковођење пројектима и потпројектима (радним пакетима)

Нема.

4.4. Уређивање научних публикација

Нема.

4.5. Предавања по позиву (осим на конференцијама)

Нема.

4.6. Рецензирање пројеката и научних резултата

Нема.

4.7. Образовање научних кадрова

Др Александра Б. Ђуновић је била ангажована као сарадник у настави за извођење лабораторијских вежби на више предмета из области Опште и неорганске хемије:

- 1) Практикум из неорганске хемије (ОАС Биохемија, УБ – Хемијски факултет) у периоду од 2019/20. до 2023/24. школске године
- 2) Основи хемије (ОАС, УБ – Биолошки факултет) током 2023/24. школске године
- 3) Хемија (ОАС, УБ – Биолошки факултет) током 2023/24. школске године.

4.8. Награде и признања

Нема.

4.9. Допринос развоју одговарајућег научног правца

Нема.

БИБЛИОГРАФИЈА КАНДИДАТА

Александра Б. Ђуновић је коаутор пет научних радова објављеним у часописима са SCI листе. Три рада су објављена у водећем међународним часописима категорије M21, док су два рада објављена у међународним часописима категорије M22.

Кандидат је коаутор 14 саопштења, од којих су три штампана у изводу на скуповима од међународног значаја (M34), а једанест саопштења је штампано у изводу на скуповима од националног значаја (M64)

Класификација радова и саопштења у је у складу са критеријумима ресорног Минисарства, Према поменутиим критеријумима посматра се година у којој је рад објављен и две године које јој претходе, те се узима година у којој је часопис најбоље рангиран, независно од области у којој је рангиран.

Профили у базама истраживача:

ORCID: 0000-0002-4690-0106

ResearcherID: AGE-6109-2022

Scopus: 57212023945

Репозиторијум Хемијског факултета Cherry:

https://cherry.chem.bg.ac.rs/APP/faces/author.xhtml?author_id=orcid::0000-0002-4690-0106

Радови објављени у водећем међународним часописима категорије M21 (M21 = 8):
3

2. **Ђуновић А. Б.**, Veljković D. Ž, Halogen bonds as a tool in the design of high energetic materials: evidence from crystal structures and quantum chemical calculations, *CrystEngComm*, 23, (2021), 6915 – 6922.
<https://doi.org/10.1039/D1CE00854D>

IF2 (2021) = 3.545

Категорија часописа: Crystallography (6/26)

Број хетероцитата (Scopus): 10

Број аутора: 2

Број бодова: 8

3. Kretić D. S., Veljković I. S., **Ђуновић А. Б.**, Veljković D. Ž, Chelate Coordination Compounds as a New Class of High-Energy Materials: The Case of Nitro-Bis(Acetylacetonato) Complexes, *Molecules*, 26, (2021), 5438 – 5448.
<https://doi.org/10.3390/molecules26185438>

IF5 (2021) = 5,110

Категорија часописа: Chemistry, Multidisciplinary (61/178)

Број хетероцитата (Scopus): 3

Број аутора: 4

Број бодова: 8

4. Kretić D. S., **Ђуновић А. Б.**, Ninković D. B., Veljković D. Ž., How Do the Surroundings of the C-NO₂ Fragment Affect the Mechanical Sensitivity of Trinitroaromatic Molecules?

Evidence from Crystal Structures and Ab Initio Calculations, *Crystals*, 15, (2025), 692.

<https://doi.org/10.3390/cryst15080692>

IF2 (2023) = 2,4

Категорија часописа: Crystallography (10/33)

Број хетероцитата (Scopus): 0

Број аутора: 4

Број бодова: 8

Радови објављени у међународним часописима категорије M22 (M22 = 5): 2

1. Veljković D. Ž., **Dunović A. B.**, Zarić S. D., Significant Differences in the Energy of X-H/Pt Interactions between Cisplatin and Transplatin Molecules, *ChemistrySelect*, 4, (2019), 12909 – 12914.

<https://doi.org/10.1002/slct.201903296>

IF5 (2019) = 1,835

Категорија часописа: Chemistry, Multidisciplinary (100/172)

Број хетероцитата (Scopus): 5

Број аутора: 3

Број бодова: 5

2. Veljković I. S., **Dunović A. B.**, Veljković D. Ž., Influence of halogen substituents on sensitivity towards detonation of polycyclic nitroaromatic high-energy molecules, *J Phys Org Chem.*, 37, (2024), e4649.

<https://doi.org/10.1002/poc.4649>

IF2 (2024) = 1,8

Категорија часописа: Chemistry, Organic (33/57)

Број хетероцитата (Scopus): 0

Број аутора: 3

Број бодова: 5

Саопштење са међународног скупа штампано у изводу (M34 = 0,5)

Укупно бодова: 1,5

1. Veljković D. Ž., **Dunović A. B.**, Quantum Chemical Study of Influence of Halogen Bonds on the Sensitivity of Organic Explosives, *Virtual 4th international symposium on halogen bonding*, 2020, Stellenbosch, South Africa, Abstract Book, p. 148.

Број аутора: 2

Број бодова: 0,5

2. Kretić D. S., **Dunović A. B.**, Veljković I. S., Veljković D. Ž., How do non-covalent interactions affect the sensitivity of high-energy materials? Analysis of crystal structures of nitroaromatic molecules, *34th European Crystallographic Meeting*, 2024, Padova, Italy, Acta Cryst., e 593.

Број аутора: 4

Број бодова: 0,5

3. Kretić D. S., Veljković I. S., Dunović A. B., Veljković D. Ž. Theoretical Study of Detonation Properties of Bis-(Nitro-acetylacetonato) Complexes, *7th European Inorganic Chemistry Conference*, Serbia, 2025, Belgrade, Abstract book, p. 135.

Број аутора: 4

Број бодова: 0,5

Саопштење са скупа националног значаја штампано у изводу (M64 = 0,5)

Укупно бодова: 5,5

1. Вељковић Д. Ж., Ђуновић А., Кретић Д, Зарић С. Д., Доказ о јаким метал-водоник интеракцијама у кристалим структурама комплекса прелазних метала, *XXV Конференција Српског кристалографског друштва*, 2018, Бајна Башта, Србија, Изводи радова, стр. 24.

Број аутора: 4

Број бодова: 0,5

2. Veljković D. Ž., Dunović A. B., Zarić S. D., Comparison of strength of metal-hydrogen interaction energies between cisplatin and transplatin molecules and different hydrogen donors, *7th Conference of the Young Chemists of Serbia*, 2019, Belgrade, Serbia, Abstract Book, p. 156.

Број аутора: 3

Број бодова: 0,5

3. Ninković D. B., Dunović A. B., Veljković D. Ž., Influence of halogen bonding on the sensitivity of high-energy molecules towards detonation, *27th conference of the Serbian crystallographic society*, 2021, Kragujevac, Serbia, Abstract Book, p. 78.

Број аутора: 3

Број бодова: 0,5

4. Dunović A. B., Kretić D. S., Veljković I. S., Veljković D. Ž., Role of noncovalent interactions in the control of the sensitivity of high energetic molecules towards detonation, *27th conference of the Serbian crystallographic society*, 2021, Kragujevac, Serbia, Abstract Book, p. 14.

Број аутора: 4

Број бодова: 0,5

5. Кретић Д. С, Вељковић И. С, Ђуновић А. Б., Вељковић Д. Ж. Нитро-ацетилацетонато комплекси као нова класа високоенергетских материјала: синтеза, карактеризација и квантохемијска прорачунавања, *58. Саветовање Српског хемијског друштва*, 2022, Београд, Србија, Кратки изводи радова, стр. 152.

Број аутора: 4

Број бодова: 0,5

6. **Dunović A. B.**, Veljković I. S., Veljković D. Ž., Influence of the presence of halogen substituents on high-energy properties of nitroaromatic molecules, *8th Conference of the Young Chemists of Serbia*, 2022, Belgrade, Serbia, Abstract Book, p. 136.

Број аутора: 3

Број бодова: 0,5

7. **Dunović A. B.**, Veljković I. S., Šajatović V., Veljković D. Ž., Role of halogen substituents in the desing of halogen-containing high-energy materials, *Twentieth Young Researchers Conference – Materials Science and Engineering*, 2022, Belgrade, Serbia, Abstract Book, p. 23.

Број аутора: 4

Број бодова: 0,5

8. Вељковић И. С, **Ђуновић А. Б.**, Вељковић Д. Ж., Теоријско проучавање утицаја халогених супституената на осетљивост полицикличних нитроароматичних експлозива, *59. Саветовање Српског хемијског друштва*, 2023, Нови Сад, Србија, Кратки изводи радова, стр. 113.

Број аутора: 3

Број бодова: 0,5

9. **Dunović A. B.**, Veljković D. Ž., Influence of the number of halogen substituents and their type on the electrostatic potential of TNB molecules, *9th Conference of the Young Chemists of Serbia*, 2023, Novi Sad, Serbia, Abstract Book, p. 104.

Број аутора: 2

Број бодова: 0,5

10. **Dunović A. B.**, Veljković D. Ž., Influence of halogen interactions on the energetic properties of halogen-substituted polycyclic nitroaromatic molecules, *11th Conference of the Young Chemists of Serbia*, 2025, Kragujevac, Serbia, Abstract Book, p. 83.

Број аутора: 2

Број бодова: 0,5

11. Kretić D. S., **Dunović A. B.**, Ninković D. B., Veljković D. Ž., Influence of the type of substituent adjacent to the C–NO₂ group on the impact sensitivity of trinitroaromatic molecules, *11th Conference of the Young Chemists of Serbia*, 2025, Kragujevac, Serbia, Abstract Book, p. 88.

Број аутора: 4

Број бодова: 0,5

Докторска дисертација (М70)

Александра Б. Ђуновић, *Квантнохемијско и кристалографско проучавање утицаја халогених супституената на детонабилност нитроароматичних експлозива*, датум одбране: 4. децембар 2025. године, ментор: др Душан Ж. Вељковић, ванредни професор Универзитета у Београду – Хемијског факултета; студијски програм: Хемија, Универзитета у Београду – Хемијски факултете.

Број поена: 6

5. КВАНТИФИКАЦИЈА НАУЧНИХ РЕЗУЛТАТА КАНДИДАТА

За природно-математичке и медицинске науке минимални квантитативни захтеви за стицање звања научни сарадник на основу члана 30, став 1, тачка 5 Закона о науци и истраживачима (Службени гласник РС, бр. 49/2019) и Правилника о стицању истраживачких и научних звања (Службени гласник РС, бр. 80/2024 и 70/2025), звање научни сарадник може стећи кандидат који има академски назив доктора наука и објављене и рецензиране научне радове и друге научноистраживачке резултате сагласно члану 76 Закона и критеријумима прописаним правилником, а који укупним научним радом и квалитетом научноистраживачког рада доприноси развоју одређене научне области.

КВАНТИФИКАЦИЈА НАУЧНИХ РЕЗУЛТАТА КАНДИДАТА

Врста резултата	Вредност резултата	Укупан број резултата (укупан број резултата који подлежу нормирању)	Укупан број бодова (укупан број бодова након нормирања)
M21	8	3 (0)	24 (24)
M22	5	2 (0)	10 (10)
M34	0,5	3	1,5
M64	0,5	11	5,5
M70	6	1	6
УКУПНО			47 (47)

Поређење са минималним квантитативним условима за избор у тражено научно звање

Природно-математичке и медицинске науке

Диференцијални услов за оцењивани период за избор у научно звање: научни сарадник	Неопходно	Остварени нормирани број бодова
Укупно	16	47
Обавезни: M11+M12+M21+M22+M23+M91+M92+M93	6	34

6. ЗАКЉУЧАК И ПРЕДЛОГ КОМИСИЈЕ

На основу анализе и личног увида у рад кандидата, комисија констатује да је др Александра Б. Ђуновић, доктор хемијских наука, истраживач-сарадник Иновационог центара Хемијског факултета постигла значајне резултата у научноистраживачком раду, али и педагошком раду као сарадник у настави. Кандидат је у значајној мери допринео истраживањима у области теоријског испитивања утицаја нековалентних интеракција, посебно у испитивању ових интеракција на детонабилности високоенергетских молекула који у свом саставу имају халогене супституенте.

Према Правилнику о стицању истраживачких и научних звања потребно је да кандидат оствари минималну вредност M коефицијента од 16, што кандидат др Александра Ђуновић премашује. Кандидат је објавио 5 научних радова и 14 саопштења на научним скуповима, са укупном нормираном вредношћу M коефицијента од 47. Научни радови на којима је кандидат коаутор објављени су у часописима који су високо ранжирани. Према подацима базе Scopus на дан 13. 12. 2025. године, ови радови су цитирани 18 пута, без аутоцитата, док Хиршов индекс износи 3.

На основу приказане анализе и оцене постигнутих резултата, Комисија констатује да резултати научноистраживачког рада др Александре Б. Ђуновић, истраживача-сарадника Иновационог центара Хемијског факултета испуњава све критеријуме прописане Статутом Универзитета у Београду – Хемијског факултета, Законом о науци и истраживањима и Правилником о стицању истраживачких и научних звања, те на основу тога предлаже Наставно-научном већу Универзитета у Београду – хемијског факултета да усвоји предлог за избор др Александре Б. Ђуновић у звање научни сарадник и упути извештај надлежним комисијама Министарства науке, технолошког развоја и иновација на одлучивање.

У Београду, 15. 12. 2025. године

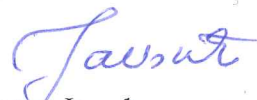
Чланови комисије:



др Душан Вељковић, ванредни професор
Универзитета у Београду – Хемијског факултета



др Весна Медаковић, доцент
Универзитета у Београду – Хемијског факултета



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