

## Прилог 5.

Назив института – факултета који подноси захтев:

Институт за нуклеарне науке Винча - Институт од националног значаја за Републику Србију, Универзитет у Београду

### РЕЗИМЕ ИЗВЕШТАЈА О КАНДИДАТУ ЗА СТИЦАЊЕ НАУЧНОГ ЗВАЊА

#### I Општи подаци о кандидату

Име и презиме: **Бојана Паскаш Мамула**

Година рођења: **1977**

ЈМБГ: **2310977785037**

Назив институције у којој је кандидат стално запослен: **Институт за нуклеарне науке Винча - Институт од националног значаја за Републику Србију, Универзитет у Београду**

Дипломирао-ла: да година: **2005.** факултет: **Физички факултет, Универзитет у Београду**

Докторирао-ла: да година: **2017.** факултет: **Физички факултет, Универзитет у Београду**

Постојеће научно звање: **Научни сарадник**

Научно звање које се тражи: **Виши научни сарадник**

Област науке у којој се тражи звање: **Природно-математичка**

Грана науке у којој се тражи звање: **Физичка хемија**

Научна дисциплина у којој се тражи звање: **Физичка хемија материјала**

Назив научног матичног одбора којем се захтев упућује: **Матични одбор за хемију**

#### II Датум избора-реизбора у научно звање:

Научни сарадник: **31.3.2023.** године

#### III Научно-истраживачки резултати (Прилог 1. и 2. правилника):

2. Радови објављени у научним часописима међународног значаја; научна критика; уређивање часописа (M20):

	број	вредност	укупно
M21a =			
M21 =	6	8	48/*40,64
M22 =	2	5	10
M23 =			
M24 =			
M25 =			
M26 =			
M27 =			
M28a =			

M286 =  
M29a =  
M296 =  
M29b =

3. Зборници са међународних научних скупова (M30):

	број	вредност	укупно
M31 =			
M32 =	1	1,5	1,5
M33 =	3	1	3/*2,56
M34 =	18	0,5	9/*8,76
M35 =			
M36 =			

6. Предавања по позиву на скуповима националног значаја (M60):

	број	вредност	укупно
M61 =			
M62 =			
M63 =	2	1	2
M64 =	2	0,2	0,4
M65 =			
M66 =			
M67 =			
M68 =			
M69 =			

**Укупно: 73,90/\*65,86**

**\*нормирано за сваки рад посебно**

**IV Квалитативна оцена научног доприноса (прилог 1 правилника):**

**4.1 Квалитет научних резултата**

**4.1.1 Научни ниво и значај резултата, утицај научних радова**

Кандидат др Бојана Паскаш Мамула објавила је 15 радова у току своје досадашње научне каријере, од тога 3 категорије међународног часописа изузетних вредности M21a, 8 у врхунском међународном часопису категорије M21, 3 у истакнутом међународном часопису (M22) и 1 у међународном часопису M23.

Др Паскаш Мамула објавила је у периоду након одлуке Научног већа о предлогу за стицање претходног научног звања 8 радова M20 категорије од којих је 6 објављено у врхунским међународним часописима категорије M21 и 2 рада у истакнутим међународним часописима M22 категорије.

***Пет најзначајних референци кандидата у периоду од последњег избора у научно звање:***

1. **Bojana Paskaš Mamula**, Bojana Kuzmanović, Mirjana Medić Ilić, Nenad Ivanović, Nikola Novaković.

**Bonding mechanism of some simple ionic systems: Bader topological analysis of some alkali halides and hydrides revisited.**

Physica B Condens Matter. 545 p.146–151 (2018)

<https://doi.org/10.1016/j.physb.2018.06.008>

Електронска структура и тополошке особине алкалних хидрида посматрани су у овом раду поређењем са широком класом алкалних халида, система са идентичном кристалном структуром и умногоме сличним електронским особинама. Аутор је у допринео радом на већини прорачуна електронске структуре и тополошких особина густине наелектрисања. Кандидат је показао да се сличност особина пре свега манифестује кроз улогу коју водоник и халогени елементи имају у интеракцији са алкалним металима. Тополошким анализом у овом раду су пронађене две тополошке класе међу припадницима класа алкалних хидрида и халида. Додатно анјон-анјон везивање је нађено код припадника једне од класа и порекло тог наелектрисања је са донора, али није завршило на акцептору, због анјон-анјон одбијања, резонантне је природе, док истовремено компензује (екранира) и катјон-катјон интеракцију. Пронађени су и кандидати за прелазе из једне у другу тополошку класу и то су LiH, KBr и RbI. Испоставља се да је велика компресибилност јона, а самим тим и адаптивност структуре на сабијање, разлог зашто је овакав прелаз код LiH мало вероватан. Код друга два кандидата се испоставља да су ови прелазни могући, али и вероватно сакривени структурним B1-B2 фазним прелазима при сабијању.

2. Sandra Kurko, **Bojana Paskaš Mamula**, Jelena Rmuš, Jasmina Grbović Novaković, Nikola Novaković

**DFT study of boron doped MgH<sub>2</sub>: Bonding mechanism, hydrogen diffusion and desorption**

International Journal of Hydrogen Energy, Volume 45, Issue 14, 13 March 2020, Pages 7947-7957

<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.05.015>

Утицај допирања бором на MgH<sub>2</sub> једињење, механизам хемијског везивања бора у унутрашњости и на површини и преферентни положаји супституције и координисања бора у овом систему испитивани су у овом раду. Кандидат је овој проблематици дао допринос кроз NEB (Nudged Elastic Bands) метод који је коришћен да се испитају преферентни путеви неутралних водоничних ваканција и јона водоника у балку и на површини у допираном и недопираном материјалу, ради поређења. Резултати су показали да бор формира снажније везе ковалентнијег карактера са преферентним тетрагоналним координисањем са суседним водоничним, што доводи до нижих десорпционих енергија (енергетских баријера за дифузију водоника), како у унутрашњости материјала, тако и у близини површине. Такође, допринос кандидата је видљив у делу рада везаном за прорачуне електронске структуре и анализу тополошких особина густине наелектрисања допираног и недопираног система.

3. Jasmina Grbović Novaković, Nikola Novaković, Sandra Kurko, Sanja Milošević Govedarović, Tijana Pantić, **Bojana Paskaš Mamula**, Katarina Batalović, Jana Radaković, Jelena Rmuš, Marina Shelyapina, Nataliya Skryabina, Patricia de Rango, Daniel Fruchart.

**Influence of defects on Mg-based hydrides stability and hydrogen sorption behavior.**

ChemPhysChem, 2019, 20(10), pp. 1216–1247

DOI: [10.1002/cphc.201801125](https://doi.org/10.1002/cphc.201801125)

У овом ревијалном раду, по позиву уредника часописа, обрађене су различите методе увођења дефеката у хидриде на бази магнезијума. У теоријском делу овог рада приказани су резултати испитивања чистих, али и материјала допираних неметалима, прелазним металима и њиховим оксидима, у унутрашњости материјала, али и на површинама и интерфејсима различитих фаза присутних у процесу сорпције водоника. У теоријском делу, приказани су резултати кандидата везани за чист  $\text{MgH}_2$  применом различитих прорачуна и анализа електронске густине наелектрисања (тополошка анализа густине наелектрисања, редуковани градијент густине наелектрисања). Допринос кандидата је пре свега у критичкој анализи приказаних радова везаних за прорачуне електронске структуре.

4. Sefa Emre Sunbul, Kursat Icin, **Bojana Paskaš Mamula**, Jana Radaković, Sultan Ozturk, Katarina Batalović,

**Theoretical and experimental study of the titanium substituted  $\text{Mg}_{2-x}\text{Ti}_x\text{Ni}$  alloys and  $\text{Mg}_{2-x}\text{Ti}_x\text{NiH}_4$  hydrides**

Int. J. Hydrog. Energy 2023

<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2023.01.323>.

У овом раду проучавани су системи  $\text{Mg}_{2-x}\text{Ti}_x\text{Ni}$  ( $x=0;0.05;0.25;0.5$ ) експериментално и теоријски у циљу испитивања њихове примене као материјала за складиштење водоника. Испитивањем  $\text{Mg}_{1.95}\text{Ti}_{0.05}\text{Ni}$  трака успешно добијених melt-spinning методом добијен је гравиметријски капацитет водоника већи од 2 wt%. Додавањем већих концентрација Ti основном једињењу  $\text{Mg}_2\text{Ni}$ , синтеза осталих система је била онемогућена наведеном методом. Кандидат је дао допринос кроз теоријску анализу једињења  $\text{Mg}_{2-x}\text{Ti}_x\text{Ni}$  ( $x=0, 0.25, 0.5$ ) и одговарајућих хидрида да би се утврдио утицај Ti на њихову стабилност, на основу теорије функционала густине (DFT). Кандидат је показао да за системе базиране на хексагоналној структури  $\text{Mg}_2\text{Ni}$ , супституција Mg атома (са стехиометријом коришћеном у синтези) са Ti доводи до пожељне дестабилизације хидрида. Додатно, формирање кубне интерметалне фазе  $\text{Mg}_3\text{TiNi}_2$  за веће концентрације Ti је препознато као могућност за постизање примене ових хидрида на собној температури. Такође, за системе са већом концентрацијом Ti, кандидат је показао да су везе Ti-H слабије (на основу тополошке анализе густине наелектрисања) због чега је могуће подешавати термодинамику ових система.

5. T. Pantić, **B. Paskaš Mamula**, K. Žagar Soderžnik, S. Kurko, I. Milanović, N. Novaković, S. Šturm, S. Drev, J. Grbović Novaković, S. Milošević Govedarović.

**The influence of defects on hydrogen sorption from Mg–V thin films.** Int. J. Hydrog. Energy 2023

<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2023.04.079>

У овом раду су проучавана својства сорпције водоника „сендвич“ танких филмова Mg-V различите дебљине, синтетисаних РФ матнетронским распршивањем. Филмови су модификовани коришћењем нискоенергетског H<sup>+</sup> јонског зрачења. Својства сорпције водоника и кинетика су испитивани методом ТОФ-ЕРДА и резултати указују да су узораци потпуно хидрогенизовани али уз присуство кисеоника у целом филму - долази до формирања MgO. ТДС и оптичка анализа указују на ниже температуре десорпције за тање филмове. Почетак десорпције не зависи од концентрације дефеката, а кинетичка анализа је показала да је енергија активације за тањи филм два пута мања. Добијени резултати су бољи у односу на чисте Mg филмове, на основу чега се потврђује улога V као катализатора у испитиваним системима. Кандидатов допринос се огледа у изради концепта рада, обради резултата добијених ТОФ-ЕРДА методом (у оквиру CERIC 0182021 - „*Characterization of changes induced by low energy ion implantation and hydrogenation of Mg-V stacked thin films*“ пројекта) анализи и тумачењу, на основу чега је потврђено да је водоник дифундовао дубоко у сам материјал.

**Од овде наведених 5 најзначајних референци у досадашњој каријери, радови под редним бројевима 1, 2 и 5 се издвајају као резултати истраживања са јединственим и преовлађујућим доприносом кандидата.**

#### **4.1.2 Цитираност научних радова кандидата**

Списак литературе у којој су афирмативно цитирани публиковани резултати кандидата налази се у приложеном материјалу и показује да су, према SCOPUS индексној бази, 15 радова др Бојане Паскаш Мамула цитирани 206 пута у периоду од 2010-2022. године, без аутоцитата, односно 218 пута са аутоцитатима. h фактор кандидата износи 7 без аутоцитата. Просечна хетероцитираност по раду је 13,73.

Радови објављени од избора у звање научни сарадник цитирани су у часописима *Journal of Materials Chemistry A* (IF 14,511) *Renewable Energy* (IF 8,634), *International Journal of Hydrogen Energy* (IF 7,139), *Scientific Reports* (IF 4,997), *ACS Sustainable Chemistry and Engineering* (IF 9,224), *Journal of Physical Chemistry C* (IF 4,177), *Rare Metals* (IF 6,318).

#### **4.1.3 Параметри квалитета радова и часописа**

Просечан број аутора по раду у периоду након одлуке научног већа ИНН Винча о предлогу за стицање претходног научног звања је 7. Просечан импакт фактор публикација у којима су објављени кандидатови радови након одлуке научног већа ИНН Винча о предлогу за стицање претходног научног звања је 4,968. Укупан импакт фактор свих радова објављених после избора у звање научни сарадник је 39,748. Укупан импакт фактор нормализован по импакту цитирајућег чланка (SNIP) радова објављених после избора у звање научни сарадник је 8,768. Укупан број М бодова M20 радова објављених након одлуке научног већа ИНН Винча о предлогу за стицање претходног научног звања по српској категоризацији научно-истраживачких резултата је 58, односно 50,64 нормализованих по броју аутора.

Од 8 радова објављених након одлуке научног већа ИНН Винча о предлогу за стицање претходног научног звања, 4 рада су са 5 аутора (нумеричке симулације), 1 са 6 (теоријски и експериментални), 1 са 7 (експериментални), 1 са 10 (експериментални) и 1 је са 13 (прегледни рад). Кандидат је био први аутор на једном раду, други аутор на два рада (од чега на једном и corresponding).

Параметри	ИФ	M20	СНИП
Укупно	39,748	58/*50,64	8,768
Усредњено по чланку	4,968	7,25/*6,33	1,096
Усредњено по аутору	5,678	8,286/*7,234	1,253

#### ***4.1.4 Степен самосталности и степен учешћа у реализацији радова у научним центрима у земљи и иностранству***

Од 8 радова из категорије M20 објављена након одлуке научног већа ИНН “Винча” о предлогу за стицање претходног научног звања, кандидат је био први аутор на једном и други аутор на два рада.

Реализацију истраживања кандидат остварује кроз рад у групи за локалне структуре и кластере Лабораторије за нуклеарну и плазма физику ангажовањем на две програмске теме у оквиру Програма 3 Института „Винча“ - „Енергетска ефикасност“ :

- 1) Теоријска истраживања материјала од интереса за примену у енергетици и заштити животне средине
- 2) Примена машинског учења у дизајну ефикасних енергетских материјала и процеса

и као члан и руководиоца Лабораторије за теоријско моделовање материјала Центра изузетних вредности за водоник и обновљиве изворе енергије CONVINCЕ Института „Винча“.

Као што је приказано у опису радова објављених од стицања претходног звања, кандидат самостално руководи и реализује истраживања везана за теоријско моделовање материјала са могућом применом у енергетици уједно са испитивање структурних и термодинамичких особина металних хидрида моделима машинског учења.

#### **4.2 Ангажованост у формирању научних кадрова**

**Институтски ментор докторске тезе** Катарине Тошић, M.Sc Факултета за физичку хемију, Универзитет у Београду од почетка 2022 (Прилог 6).

#### **4.3 Нормирање броја коауторских радова, патената и техничких решења**

Др Паскаш Мамула објавила је у периоду након одлуке Научног већа о предлогу за стицање претходног научног звања 8 радова M20 категорије од којих 4 спадају у нумеричке симулације (M21-1, M21-4, M21-5 и M22-2), 2 су радови са експерименталним и теоријским резултатима (M21-3 и M21-6) и 2 рада (M21-2 и M22-1) су експериментална.

Од ових 8 радова M20 категорије, 4 рада у којима су рађене нумеричке симулације нису захтевала нормирање јер су у питању радови са 5 аутора. Ревизијални рад M21-6 који обухвата и експерименталне резултате и прорачуне засноване на теорији функционала густине има 13 аутора и нормиран је према правилима за радове са више од 7 аутора, док рад у истој категорији M21-3 са 6 аутора не подлаже нормирању. Од два експериментална рада која су наведена, један има 7 аутора (M22-1) па се не нормира док други (M21-1) има 10 аутора и нормира се према формули за експериментални рад са више од 7 аутора.

#### **4.4 Руковођење пројектима, потпројектима и пројектним задацима (Прилог 9)**

Иновациони фонд Републике Србије, Пројекат „Доказ концепта“ број 5415: „Од природне глине пиропилита (Парсовићи) до електрохемијског сензора за детекцију трагова пестицида у храни и води“ - **руковођење пројектним задатком број 2** - „Characterization of materials“.

**Руководилац Лабораторије за теоријско моделовање материјала и машинско учење у оквиру Центра изузетних вредности за водоничну енергетику и обновљиве изворе енергије – CONVINCЕ (2022).**

#### **4.5 Активност у научним и научно стручним друштвима и остали показатељи успеха у научном раду (Прилог 5)**

- Члан комисије Научног Већа за образовну делатност Института за нуклеарне науке Винча - Института од националног значаја за Републику Србију, Универзитет у Београду у сазиву 2018-2022
- Члан комисије Научног Већа за научноистраживачки план и програм Института за нуклеарне науке Винча - Института од националног значаја за Републику Србију, Универзитет у Београду у сазиву 2022-2024
- Члан надзорног одбора научно-стручног друштва „Иницијатива за водоничну енергетику Србије“

Кандидат је био члан у одборима следећих међународних научних конференција (Прилог 7):

- **2018**, Потпредседник и члан организационог одбора - 3rd International Symposium on Materials for Energy Storage and Conversion, Београд, Србија
- **2017**, Члан организационог одбора конференције „2nd Workshop of French, Croatian and Serbian Researchers on Hydrogen Storage and Energy Related Materials“
- **2016**, Члан организационог одбора конференције „Workshop of French, Croatian and Serbian Researchers on Hydrogen Storage and Energy Related Materials“

Др Бојана Паскаш Мамула је била рецензент у следећим научним часописима (Прилог 4):

- Solid State Communications (IF 2018 1.59)
- International Journal of Hydrogen Energy (IF 2021 7,139)

Др Бојана Паскаш Мамула је била **технички уредник књиге апстраката** са 3<sup>rd</sup> International Symposium on Materials for Energy Storage and Conversion - mESC-IS 2018 и **уредник Годишњег извештаја Центра изузетних вредности** за водоничну енергетику и обновљиве изворе енергије 2019 (Прилог 4).

#### **4.6 Утицај научних резултата**

Цитираност објављених радова, листа радова у којима су радови аутора цитирани, као и квалитет часописа у којима је кандидат објављивао своје резултате дати су у прилозима 1, 3.1 и 3.2.

#### **4.7 Уводна предавања на конференцијама, друга предавања и активности**

Позивно предавање на међународној конференцији 4th International Meeting on Materials Science for Energy Related Applications – 4IMMSERA, 22-23.9.2021. Факултета за физичку хемију, Универзитет у Београду, Србија. Назив предавања: Interaction of light alkali metals with ammonia borane: a theoretical study, 22.9.2021. (Прилог 8)

### **V Оцена комисије о научном доприносу кандидата са образложењем:**

На основу анализе остварених резултата може се закључити да је др Бојана Паскаш Мамула веома успешна у свом досадашњем научно-истраживачком раду.

У периоду протеклом након одлуке Научног већа ИНН „Винча“ о предлогу за стицање претходног научног звања, резултате истраживања кандидат је објавио у оквиру 8 радова у међународним часописима, од којих 6 радова у врхунским међународним часописима (M21) и 2 рада у истакнутим међународним часописима (M22). Остале категорије публикација укључују: 1 предавање по позиву са међународног скупа штампаног у изводу (M32), 3 саопштења са међународног скупа штампана у целини (M33) и 18 саопштења са међународних конференција штампаних у изводу (M34). Такође, објављена су и 2 саопштења са скупа националног значаја штампана у целини (M63) и 2 саопштења са скупа националног значаја штампана у изводу (M64).

Научна компетентност кандидата др Бојане Паскаш Мамуле је **73,90/\*65,86** бодова, што знатно превазилази квантитативне критеријуме за избор у звање виши научни сарадник, прописане Правилником о стицању истраживачких и научних звања (Сл. Гласник РС, бр. 159/2020, 14/2023-51). Такође је потребно истаћи цитираност кандидата као битан показатељ квалитета његовог рада (206 хетероцитат и Хиршов индекс 7).



Пројекат „Доказ концепта“ Фонда за иновациону делатност Републике Србије „Од природне глине пиропилита (Парсовићи) до електрохемијског сензора за детекцију трагова пестицида у храни и води“ у коме кандидат руководи пројектним задатком представља почетак бављења новом класом материјала применом стечених знања и проширивањем истих. Руководилац је Лабораторије за теоријско моделовање материјала и машинско учење у оквиру Центра изузетних вредности за водоничну енергетику и обновљиве изворе енергије – CONVINCЕ (2022). Др Бојана Паскаш Мамула је учествовала у оснивању научно стручног друштва „Иницијатива за водоничну енергетику Србије“ - ИВЕС иза кога је идеја о помоћи основним и примењеним истраживањима у области водоничне енергетике, као и активној промоцији одрживе водоничне економије у Србији, чиме је значајно допринела развоју науке у земљи.

Др Бојана Паскаш Мамула је активна у организацији међународних конференција и била је учесник у организацији 3 научна скупа.

Комисија сматра да научно-истраживачки рад Бојане Паскаш Мамуле представља значајан допринос у области материјала са применом у енергетици, али и у примени материјала у области складиштења енергије. Имајући у виду оригиналност њених истраживања и значајан допринос научним сазнањима и методолошким приступима, као и квалитету публикованих резултата, а у складу са Правилником о стицању истраживачких и научних звања (Сл. Гласник РС, бр. 159/2020, 14/2023-51), чланови Комисије сматрају да кандидат испуњава све услове за избор у научно звање ВИШИ НАУЧНИ САРАДНИК.

У Београду, 29.5.2023. године

**ПРЕДСЕДНИК КОМИСИЈЕ**

---

Др Никола Новаковић  
Научни саветник, ИНН Винча

Пројекат „Доказ концепта“ Фонда за иновациону делатност Републике Србије „Од природне глине пиропилита (Парсовићи) до електрохемијског сензора за детекцију трагова пестицида у храни и води“ у коме кандидат руководи пројектним задатком представља почетак бављења новом класом материјала применом стечених знања и проширивањем истих. Руководилац је Лабораторије за теоријско моделовање материјала и машинско учење у оквиру Центра изузетних вредности за водоничну енергетику и обновљиве изворе енергије – CONVINCЕ (2022). Др Бојана Паскаш Мамула је учествовала у оснивању научно стручног друштва „Иницијатива за водоничну енергетику Србије“ - ИВЕС иза кога је идеја о помоћи основним и примењеним истраживањима у области водоничне енергетике, као и активној промоцији одрживе водоничне економије у Србији, чиме је значајно допринела развоју науке у земљи.

Др Бојана Паскаш Мамула је активна у организацији међународних конференција и била је учесник у организацији 3 научна скупа.

Комисија сматра да научно-истраживачки рад Бојане Паскаш Мамуле представља значајан допринос у области материјала са применом у енергетици, али и у примени материјала у области складиштења енергије. Имајући у виду оригиналност њених истраживања и значајан допринос научним сазнањима и методолошким приступима, као и квалитету публикованих резултата, а у складу са Правилником о поступку, начину вредновања и квантитативном исказивању научноистраживачких резултата, чланови Комисије сматрају да кандидат испуњава све услове за избор у научно звање ВИШИ НАУЧНИ САРАДНИК.

У Београду, 29.5.2023. године

**ПРЕДСЕДНИК КОМИСИЈЕ**



Др Никола Новаковић  
Научни саветник, ИНН Винча

МИНИМАЛНИ КВАНТИТАТИВНИ ЗАХТЕВИ ЗА СТИЦАЊЕ ПОЈЕДИНАЧНИХ  
НАУЧНИХ ЗВАЊА (За природно-математичке и медицинске науке)

Диференцијалн и услов - од првог избора у претходно звање до избора у звање	Потребно је да кандидат има најмање XX поена, који треба да припадају следећим категоријама:		
		Неопходно XX=	Остварено
<b>Виши научни сарадник</b>	Укупно	50	73,9/*65,86
Обавезни (1)	M10+M20+M31+M32+M33+M41+M42+M90	40	62,5/*54,7
Обавезни (2)	M11+M12+M21+M22+M23	30	58/*50,64