

Универзитет саопшаст
Милошевић

Број	ЕНО	07.02.2019
Оп	Д	
03	110/10	- -

НАСТАВНО-НАУЧНОМ ВЕЋУ ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКОГ
ФАКУЛТЕТА У КРАГУЈЕВЦУ

На седници Наставно-научног већа Природно-математичког факултета у Крагујевцу одржаној **30.01.2019.** године (одлука број: **90/VII-1**) одређени смо у Комисију за писање извештаја о испуњености услова др Едине Авдовић за стицање звања *научни сарадник*, за научну област Хемија. На основу приложене документације о научно-истраживачком раду кандидата, сагласно критеријумима за стицање научних звања, утврђеним *Правилником о поступку и начину вредновања и квантитативном исказивању научно-истраживачких резултата истраживача* надлежног Министарства, а у складу са **Законом о научноистраживачкој делатности**, подносимо Наставно-научном већу следећи

ИЗВЕШТАЈ

А. Биографски подаци

Едина Авдовић је рођена 10.09.1979. године у Новом Пазару. Основну школу и Гимназију, смер природно-математички завршила је у Новом Пазару. На студијски програм Хемија, Депарتمان за хемијско-технолошке науке на Државном универзитету у Новом Пазару уписала се 2009/10. године, где је и дипломирала у септембру 2013. године, са просечном оценом 9,13. Дипломски рад под називом „Синтеза и карактеризација комплексних једињења неких прелазних метала са антибиотицима” одбранила је септембра 2013. године код доц. др Тање Солдатовић са оценом 10. Мастер студије је уписала 2013. године на Природно-математичком факултету Универзитета у Приштини, са седиштем у Косовској Митровици, где је и дипломирала са просечном оценом 9,70. Мастер рад под називом „Синтеза и потпуна асигнација ^1H и ^{13}C спектра етил 2-[(3-нитро-2-оксо-2Н-хромен-4-ил)амино]ацетата” одбранила је октобра 2014. године код доц. др Видослава Декића са оценом 10. Докторске академске студије, уписала је на Природно-математичком факултету у Крагујевцу, школске 20014/15. године, под менторством проф. др Срећка Трифуновића, редовног професора Природно-математичког факултета у Крагујевцу. Докторску дисертацију под насловом „Синтеза, карактеризација и биолошка активност неких деривата кумарина и одговарајућих Pd(II) комплекса” одбранила је 27.12.2018. године на Природно-математичком факултету у Крагујевцу.

У Институту за хемију на Природно-математичком факултету у Крагујевцу марта 2017. године је изабрана у звање истраживача-приправника, а од априла 2018. године је изабрана у звање истраживача-сарадника за научну област Хемија. Од фебруара 2018. године ангажована је на пројекту (ОИ172016) које финансира Министарство просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије.

До сада је објавила осам научних радова у познатим часописима међународног значаја (два рада из категорије **M21**, четири рада из категорије **M22** и два рада из категорије **M23**), по четири саопштења на међународним конвенцијама штампана у целини и у изводу (**M33** и **M34**), два саопштења на домаћим конференцијама штампана у целини (**M63**) и осам саопштења на домаћим конференцијама штампана у изводу (**M64**).

Др Едина Авдовић учествује у раду са студентима и до сада је водила вежбе на Департману за хемијско-технолошке науке на Државном универзитету у Новом Пазару из предмета: Органска хемија, Хемија природних производа, Хемија хране, на основним студијама хемије, прехранбене технологије и биологије, као и на Природно-математичком факултету, Универзитета у Крагујевцу из предмета Неоргански индустријски загађивачи на основним студијама хемије.

Б. Библиографија

Др Едина Авдовић се активно бави научно-истраживачким радом у области органометалне хемије. Предмет њених истраживања јесу: синтеза нових деривата кумарина и одговарајућих комплекса прелазаних метала (пре свега паладијум(II) јона); карактеризација новосинтетисаних једињења помоћу IR и NMR спектроскопије, DFT метода као и помоћу рендгенске структурне анализе. Други део истраживања се односи на: *in vitro* испитивање цитотоксичности синтетисаних једињења применом *MTT* теста *цитотоксичности*, као и *in vitro* испитивање антимикуробне активности применом микродилуционе методе. На крају, истраживања су заокружена применом симулационих метода (докинг и молекулска динамика) компјутерске хемије у циљу коначног дефинисања механизма дејства синтетисаних једињења.

1. Докторска дисертација (M71)

1 x 6 = 6

Едина Х. Авдовић „Синтеза, карактеризација и биолошка активност неких деривата кумарина и одговарајућих Pd(II) комплекса ”

Природно-математички факултет, Универзитет у Крагујевцу, Крагујевац, 2018.

1. Списак научних радова

1.1. Научни радови публиковани у врхунским часописима међународног значаја (M₂₁=8):

8+8=16 поена (Нормирано:5+5=10 поена)

1.1.1. Edina H. Avdović, Dejan Milenković, Jasmina M. Dimitrić Marković, Jelena Đorović, Nenad Vuković, Milena D. Vukić, Verica V. Jevtić, Srećko R. Trifunović, Ivan Potočňák, Zoran Marković, Synthesis, spectroscopic characterization (FT-IR, FT-Raman, and NMR), quantum chemical studies and molecular docking of 3-(1-(phenylamino)ethylidene)-chroman-2,4-dione, *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 195 (2018) 31–40, IF₂₀₁₇=2,88, ISSN:1386-1425, DOI: 10.1016/j.saa.2018.01.023. **(5 поена)**

1.1.2. Edina H. Avdović, Dušan S. Dimić, Jamina Dimitrić Marković, Nenad Vuković, Milanka Đ. Radulović, Marko N. Živanović, Nenad D. Filipović, Jelena R. Đorović, Srećko R. Trifunović, Zoran S. Marković, Spectroscopic and theoretical investigation of the potential anti-tumor and anti-microbial agent, 3-(1-((2-hydroxyphenyl)amino)ethylidene) chroman-2,4-dione, *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 206 (2019) 421–429, IF₂₀₁₇=2,88, ISSN:1386-1425, DOI:10.1016/j.saa.2018.08.034. **(5 поена)**

1.2. Научни радови објављени у истакнутим међународним часописима (M₂₂=5):

4×5=20 поена (Нормирано: 2,8+5+3,1+3,1=14 поена)

1.2.1. Edina H. Avdović, Danijela LJ. Stojković, Verica V. Jevtić, Milica Kosić, Biljana Ristić, Ljubica Harhaji-Trajković, Milena Vukić, Nenad Vuković, Zoran S. Marković, Ivan Potočňák, Srećko R. Trifunović; Synthesis, Characterization and Cytotoxicity of a new Palladium(II) Complex with a Coumarin-Derived ligand 3-(1-(3-hydroxypropylamino)ethylidene) chroman-2,4-dione. Crystal structure of the 3-(1-(3-hydroxypropylamino)ethylidene) chroman-2,4-dione; *Inorganica Chimica Acta*, 466 (2017) 188–196, IF₂₀₁₇=2,264, ISSN: 0020-169, DOI: 10.1016/j.ica.2017.06.015. **(2.8 поена)**

1.2.2. Edina H. Avdović, Dejan Milenković, Jasmina M. Dimitrić-Marković, Nenad Vuković, Srećko R. Trifunović and Zoran S. Marković; Structural, spectral and NBO analysis of 3-(1-(3-hydroxypropylamino)ethylidene) chroman-2,4-dione; *Journal of Molecular Structure*, 1147 (2017) 69-75, IF₂₀₁₇=2,011, ISSN: 0022-2860, DOI: 10.1016/j.molstruc.2017.06.094. **(5 поена)**

1.2.3. D. Milenković, J. Đorović, S. Jeremić, J. M. Dimitrić Marković, E. H. Avdović, Z. Marković; Free radical scavenging potency of dihydroxybenzoic acids; *Journal of Chemistry*, 2017 (2017) 1–9, IF₂₀₁₇=1,726, ISSN: 0973-4945, DOI: 10.1155/2017/5936239. **(3,1 поена)**

1.2.4. **Edina H. Avdović**, Danijela Lj. Stojković, Verica V. Jevtić, Dejan Milenković, Zoran S. Marković, Nenad Vuković, Ivan Potočňák, Ivana D. Radojević, Ljiljana R. Čomić, Srećko R. Trifunovića, Preparation and antimicrobial activity of a new palladium(II) complexes with a coumarin-derived ligands. Crystal structures of the 3-(1-(o-toluidino) ethylidene)-chroman-2,4-dione and 3-(1-(m-toluidino)ethylidene)-chroman-2,4-dione, *Inorganica Chimica Acta*, 206 (2019) 421–429, IF₂₀₁₇=2,264, ISSN: 0020-169. DOI: 10.1016/j.ica.2018.09.014. (3,1 поена)

1.3. Научни радови објављени у међународним часописима (M₂₃=3):
3×2=6 поена (Нормирано:2,1+1,9=4 поена)

1.3.1. Dejan Milenković, Jelena Đorović, Vladimir Petrović, **Edina H. Avdović** and Zoran Marković; Hydrogen atom transfer versus proton coupled electron transfer mechanism of gallic acid with different peroxy radicals. *Reac Kinet Mech Cat.* 123 (2018) 215-230, IF₂₀₁₇=1,515, ISSN: 1878-5190, DOI 10.1007/s11144-017-1286-8. (2,1 поена)

1.3.2. Dejan Milenković, **Edina H. Avdović**, Dušan Dimić, Nenad Vuković, Srećko R. Trifunović and Zoran S. Marković; Reactivity of the Novel Coumarine Derivative towards Cartilage Proteins: Combined NBO, QTAIM and Molecular Docking study. *Monatshefte Fur Chemie - Chemical Monthly* 149 (2018) 159–166, IF₂₀₁₇ =1,285, ISSN: 0026-9247, DOI: 10.1007/s00706-017-2051-4. (1,9 поена)

2. Списак научних саопштења на међународним и националним конференцијама

2.1. Саопштења на међународним научним конференцијама штампана у целини (M₃₃=1):
4×1=4

2.1.1. D. Milenković, S. Trifunović, **E. Avdović**, N. Vuković, M. Vukić, J. Dimitrić-Marković, Z. Marković, *Experimental and theoretical study of the UV-Vis spectrum of a new coumarine-derived ligand*, 2nd EAI International Conference on Future Access Enablers of Ubiquitous and Intelligent Infrastructures (Fabulous 2016), Belgrade 2016.

2.1.2. **E. H. Avdović**, A. Amić, D. Milenković, V. V. Jevtić, S. R. Trifunović, *Experimental and theoretical vibrational study of 3-(1-(2- mercaptoethylamino) ethylidene)-chroman-2,4-dion*, 14th International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry, Beograd, p.93, ISBN 978-86-82475-36-1,

2.1.3. D. Dimić, **E. Avdović**, S. Trifunović, I. Potočňák, J. Dimitrić-Marković, Z. Marković, *Synthesis and crystallographic structure of novel coumarin derivative with dopamine*, 14th International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry, Beograd, p.113, ISBN 978-86-82475-36-1.

2.1.4. D. Sretenović, G. Jovanović, D. Milenković, **E. Avdović**, J. Đorović, D. Dimić, J. Dimitrić Marković, *The effect of additional oh group on the antiradical activity in dopamine/6-oh dopamine and octopamine/norepinephrine pairs*, 14th International

Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry, Beograd, p.575, ISBN 978-86-82475-37-8.

- 2.2. Саопштења на међународним научним конференцијама штампана у изводу (M₃₄=0,5):**
4×0,5=2
- 2.2.1. Edina H. Avdović, Srećko Trifunović, Dejan Milenković, Zana Dolićanin, Marijana Stanojević Pirković, Zoran Marković, *Computational molecular docking studies of the Novel Coumarine Derivative towards Ubiquinol-Cytochrome C Reductase Binding Protein and Methylenetetrahydrofolate reductase*, 4th South-East European Conference on Computational Mechanics (SEECCM 2017), Kragujevac 2017, p. 25. ISBN: 978-86-921243-0-3.**
- 2.2.2. Jelena Đorović, Svetlana Jeremić, Edina Avdović, Ana Amić, Jamina M. Dimitrić Marković, Antioxidant activity of the Carboxylate anions of the selected dihydroxybenzoic acids, 4th South-East European Conference on Computational Mechanics (SEECCM 2017), Kragujevac 2017, p. 24. ISBN: 978-86-921243-0-3.**
- 2.2.3. Edina Avdović, Dejan Milenković, Jasmina M. Dimitrić Marković, Srećko R. Trifunović, and Zoran Marković, *Molecular docking study on the interaction of human procalcitonin with 3-(1-(2-mercaptoethylamino) ethylidene)-chroman-2,4-dion*, Belgrade BioInformatics Conference 2018, Beograd, p.100, ISSN 2334-6590.**
- 2.2.4. Ana Amić, Zoran Marković, Edina Avdović, Bono Lučić, Dragan Amić, *DFT and pm7 study of radical inactivation by selected heterocyclic compounds with coumarin core*, 2018, 30th MC² Conference, Dubrovnik, 2018.**
- 2.3. Саопштења на националним научним конференцијама штампана у целини (M₆₃=0,5):**
2×0,5=1 поена (Нормирано: 0,5+0,4=0,91 поена)
- 2.3.1. E. Avdović, S. Jeremić, A. Amić, M. Pirković, D. Milenković, J. Đorović, Z. Marković; *Antioksidativna i inhibitorska aktivnost alizarin-2-glikozida*; XXIII Savetovanje o biotehnologiji, Čačak, 2018, p.409, ISBN: 978-86-87611-55-9 (0,5 поена).**
- 2.3.2. E. Avdović, D. Milenković, S. Jeremić, J. Đorović, N. Vuković, Z. Dolićanin, S. R. Trifunović, Z. Marković; *Ligand-protein interakcije 3-(1-(3-hidroksipropilamin)-etiliden)hroman-2,4-diona sa humanim C reaktivnim proteinom*; XXIII Savetovanje o biotehnologiji, Čačak, 2018, p.403, ISBN: 978-86-87611-55-9 (0,41 поена)..**
- 2.4. Саопштења на националним научним конференцијама штампана у изводу (M₆₄=0,2):**
8×0,2=1,6 поена (Нормирано: 4×0,17+2×0,2+0,14=1,39 поена)

- 2.4.1. D. Stojković, V. Jevtić, S. Trifunović, N. Vuković, M. Vukić, I. Potočnjak, **E. Avdović**, S. Jovičić; *Synthesis and crystal structure of 3-(1-(3-hydroxypropylamino)ethylidene)chroman-2,4-dione*; XXIII konferencija Srpskog kristalografskog društva, Andrevlje, 2016, p.85. ISBN: 978-86-912959-3-6 (0,17 поена).
- 2.4.2. **E. Avdović**, V. Jevtić, N. Vuković, M. Vukić S. Trifunović, Z. Marković, I. Potočnjak, S. Trifunović; *Synthesis and crystal structure of 3-(1-o-toluidino-ethylidene)-chromane-2,4-dione*; XXIV konferencija Srpskog kristalografskog društva, Vršac, 2017, p.31. ISBN: 978-86-912959-3-6 (0,17 поена).
- 2.4.3. D. Stojković, V. Jevtić, S. Trifunović, N. Vuković, M. Vukić, O. Klisurić, **E. Avdović**, S. Jovičić; *Synthesis and crystal structure of methyl ester of 3-phenyl-2-thioureido-propanoic acid*; XXIV konferencija Srpskog kristalografskog društva, Vršac, 2017, p.27. ISBN: 978-86-912959-3-6 (0,17 поена).
- 2.4.4. **E. H. Avdović**, V. V. Jevtić, Marijana P. Kasalović, Danijela Lj. Stojković, Sandra Jovičić, N. Vuković, Z. Marković, I. Potočnjak, S. R. Trifunović, *Synthesis and crystal structure of 3-(1-m-toluidinoethylidene)-chromane-2,4-dione*, XXV konferencija Srpskog kristalografskog društva, Bajina Bašta, 2018, p.46. ISBN 978-86-912959-4-3 (0,14 поена).
- 2.4.5. **E. Avdović**, D. Milenković, J. Đorović, M. Živanović, S. Trifunović, Z. Marković, *Ispitivanje interakcije između glutation-S-transferaze i 3-(1-(2-hidroksifenilamino)etiliden)-hroman-2,4-diona*, Drugi kongres biologa Srbije, Kladovo, p.23, ISBN: 978-86-81413-08-1 (0,2 поена).
- 2.4.6. Z. Marković, S. R. Trifunović, **E. Avdović**, *Derivati kumarina kao potencijalni antikancerogeni lekovi*, Drugi kongres biologa Sbiје, Kladovo, p.20, ISBN: 978-86-81413-08-1 (0,2 поена).
- 2.4.7. A. Amić, D. Milenković, J. Đorović, S. Jeremić, **E. Avdović**, Z. Marković, J. Dimitrić Marković, D. Amić, *Oksidativni stres-endogena i egzogena zaštita*, Drugi kongres biologa Sbiје, Kladovo, p.266, ISBN: 978-86-81413-08-1 (0,17 поена).
- 2.4.8. **E. Avdović**, J. Đorović, D. Milenković, Ž. Milanović, D. Dimić, J. Dimitrić Marković, Lj. Joksović, A. Amić, *Antioksidativna aktivnost odabranih triazola*, Drugi kongres biologa Sbiје, Kladovo, p.24, ISBN: 978-86-81413-08-1 (0,17 поена).

В. Приказ радова

1. Приказ докторске дисертације

У оквиру ове докторске дисертације синтетисано је седамнаест једињења, од тога девет деривата кумарина и осам одговарајућих паладијум(II) комплекса. Код квадратно-планарних комплекса паладијума(II) са дериватима кумарина као лиганадима граде се веома стабилне везе остварене путем координације енаминског атома азота и карбонилног атома кисеоника О3 и јона паладијума(II).

Паладијум(II) комплекси добијени су у реакцији раствора $K_2[PdCl_4]$ и еквимоларних количина новосинтетисаних деривата кумарина. После мешања сваког комплекса добија се жут односно, наранџаст талог.

За сва синтетисана једињења урађена је елементална микроанализа и спектрална анализа (IR, 1H и ^{13}C NMR) да би се потврдиле предложене молекулске структуре, док у случају паладијум(II) комплекса подржавају квадратно-планарну геометрију. Структура молекула свих синтетисаних једињења потврђена је помоћу DFT метода, коришћењем базисног сета 6-311++G(d,p), функционала B3LYP-D3BJ, док код неких једињења су добијени монокристали, па је структура потврђена и рендгенском структурном анализом.

Цитотоксичност синтетисаних једињења испитана је *in vitro* применом МТТ теста цитотоксичности. Цитотоксична активност неких лиганата и одговарајућих паладијум(II) комплекса испитивана је на три хумане ћелијске линије: хуманој ћелијској линији карцинома дојке (MDA-MB-231), здравој ћелијској линији плућног ткива (MRC-5) и хуманој ћелијској линији колоректалног карцинома (HCT-116). За један лиганд и одговарајући паладијум(II) комплекс испитивања су вршена на хуманој ћелијској линији глиобластома (U251) и ћелијској линији меланома миша (B16).

Резултати *in vitro* су показали да је највећа цитотоксична активност деривата кумарина и одговарајућих паладијум(II) комплекса на хуманој ћелијској линији колоректалног карцинома (HCT-116), док на здравој ћелијској линији плућног ткива (MRC-5) ова једињења нису показала активност, што значи да једињења нису токсична.

Антимикробна активност синтетисаних једињења испитана је *in vitro* на седамнаест микроорганизама (девет бактерија и осам гљива) применом микродилуционе методе.

Резултати *in vitro* су показали да је највећа антифунгална активност неких новосинтетисаних једињења према гљиви *Candida albicans*, док најбољу антибактеријску активност су показали према бактеријама *Bacillus subtilis* и *Bacillus cereus*.

2. Приказ научних радова

2.1. Приказ радова из категорије M21

Рад 2.1.1. Синтетисан је нови дериват кумарина 3- (1- (фениламино) етилиден)-хроман-2,4-дион. Рендгенска структурна анализа и спектроскопске методе (FT-IR и FT-Raman, 1H и ^{13}C NMR) заједно са DFT прорачунима коришћене су да би се окарактерисала структура испитиваног деривата кумарина. Помоћу Фукуи функција одређена места електрофилног, нуклеофилног и радикалног напада у структури испитиваног молекула. Донорско-акцепторске интеракције, као и трансфер наелектрисања су испитане помоћу NBO анализе. Молекулским докингом је испитана инхибиторна моћ испитиваног једињења према неким

важним хуманим протеинима Убихинон цитохром Ц редуктазе и Метилентетрахидрофолат редуктазе. Активност је добијена за десет конформација испитиваног молекула.

Рад 2.1.2. Синтетисан је нови дериват кумарина 3-(1-((2-хидоксифенил)амино)-етилиден)хроман-2,4-диона и окарактерисан помоћу IR, ^1H и ^{13}C NMR спектроскопије и помоћу рендгенске структурне анализе. У раду је такође приказана и теоријска анализа структуре деривата кумарина и аминофенола. Реактивност датог једињења је испитана NBO, QTAIM и методом молекулског докинга. Испитана је и биолошка активност антимикуробна и антитуморска новосинтетисаног једињења. Антимикуробна активност је испитана на седам врста микроорганизама применом микродилуционе методе, где се MIC (минимална инхибиторна концентрација) и MMC (минимална микробицидна концентрација) користе као параметари антимикуробног деловања. Утврђено да постоји активност према испитиваним врстама бактерија и гљива. Цитотоксичност испитиваног једињења је испитана применом МТТ теста, где се IC₅₀ вредности користе као параметар цитотоксичности. Значајан цитотоксични ефекат је примећен према хуманој ћелијској линији колоректалног карцинома НСТ-116.

Рад 2.2.1. У овом раду је синтетисан дериват кумарина, 3-(1-(3-хидроксипропил-амино)етилиден)хроман-2,4-дион и одговарајући паладијум(II) комплекс. Синтетисана једињења су окарактерисана елементалном микроанализом, IR, ^1H и ^{13}C NMR спектроскопијом. Структура лиганда потврђена је применом монокристалне рендгенске структурне анализе, док је структура квадратно-планарног паладијум(II) комплекса потврђена применом теорије функционала густине (DFT). На основу елементалне микроанализе, NMR спектроскопије и DFT прорачуна утврђено је да је однос метал:лиганд=1:1, што значи да је лиганд тридентатни, односно да се координација лиганда за паладијум(II) јон врши преко енамисног атома азота и кисеоникових атома O3 и O4. Испитана је цитотоксичност синтетисаних једињења применом МТТ теста на две ћелијске линије и то: хуманој ћелијској линији глиобластома (U251) и ћелијској линији меланома миша (B16), где се IC₅₀ вредности користе као параметар цитотоксичности. Примећен је значајан цитотоксични ефекат паладијум(II) комплекса према испитиваним ћелијским линијама.

Рад 2.2.2. У овом раду је експериментално и теоријски испитивана структура 3-(1-(3-хидроксипропиламино)етилиден)хроман-2,4-дион. У циљу испитивања молекулске структуре и спектроскопског понашања деривата кумарина коришћене су различите експерименталне спектроскопске методе (FT-IR, ^1H и ^{13}C NMR) заједно са DFT прорачунима на D3LYP-D3BJ/311+G(d,p) нивоу теорије коришћене су да би се окарактерисала структура испитиваног деривата кумарина. На основу коефицијента корелације и средње апсолутне грешке је закључено да овај ниво теорије добро описује експерименталну структуру.

Рад 2.2.3. У овом раду је испитивана антиоксидативна активност дихидроксибензоеве киселине (DHBA). Да би се проценила њихова моћ радикалног чишћења, коришћена је теорија функционала густине и то два нивоа теорије M05-2X/6-311++G(d,p) и B3LYP-D2/6-

311++G(d,p). Испитивана су три могућа механизма антиоксидативног дејства: пренос водониковог атома (HAT), пренос једног електрона праћен преносом протона (SET-PT), и пренос протона праћен преносом електрона (SPLET). Сви ови механизми су проучавани у неполарним (бензен и пентилетаноат) и поларним (вода) растварачима коришћењем солватационог модела (SMD). У вези са овим механизмима су израчунати: енталпија дисоцијације веза (BDE), јонизациони потенцијал (IP), афинитет према протону (PA) и трансфер електрона (ETE). Добијени резултати указују на HAT механизам као најповољнији реакциони пут за антиоксидативно деловање DHBA у бензену. С друге стране, SPLET је означен као доминантан реакциони механизам у поларном растварачу, SET-PT механизам није повољан пут реакције за антиоксидативно дејство у било којем растварачу.

Рад 2.2.4. У овом раду је синтетисано пет деривата кумарина и пет одговарајућих паладијум(II) комплекса. Синтетисана једињења су окарактерисана елементалном микроанализом, IR, ¹H и ¹³C NMR спектроскопијом. Структура два лиганда потврђена је применом рендгенске структурне анализе, док је структура осталих лиганда, као и квадратно-планарних паладијум(II) комплекса потврђена DFT прорачуна. У ту сврху коришћен је 6-311 + G(d,p) ниво теорије, док је за паладијом коришћен def2-TZVPD, базисни скуп. Закључено је на основу коефицијента корелације и средње апсолутне грешке да овај теоријски модел добро описује експериментално предложену структуру. Испитана је антимикуробна активност свих једињења на седамнаест врста микроорганизама применом микродилуционе методе. Утврђен је значајан антифунгални ефекат једног паладијум(II) комплекса, док остала једињења нису показала значајну ни антибактеријску ни антифунгалну активност.

Рад 2.3.1. У овом раду је описана реакције галне киселине (GA) са алкил перокси радикалима (метилперокси, етилперокси, изо-пропилперокси и терц-бутилперокси). Ове реакције су симулиране помоћу DFT метода. Реакција се одвија тако да се врши пренос водониковог атома хидроксилне групе GA на кисеоник сваког од перокси радикала. Ове реакције се могу одвијати преко два различита механизма: пренос водониковог атома и спрегнути пренос протона и електрона. Конкурентност између ових механизма зависи и од растварача и од природе слободних радикала. Описане су главне разлике ових механизма, заједно са одговарајућим термодинамичким и кинетичким последицама.

Рад 2.3.2. У овом раду је испитана реактивност кумаринског деривата 3-(1-(3-хидроксипропил-амино)етилиден)хроман-2,4-дион помоћу DFT метода. Интеркције са протеинима хрскавице испитане су коришћењем молекулског докинга. На основу NBO, QTAIM анализе као и Фукуи функције одређена места електрофилног, нуклеофилног и радикалског напада у структури испитиваног кумаринског деривата. Донорско-акцепторске интеракције, као и трансфер наелектрисања су испитане помоћу NBO анализе.

Г. Цитираност

Према бази Science Citation Index 8 радова др Едине Авдовић цитирани су 18 пута у међународним часописима (не рачунајући аутоцитате, извор ISI Web of Knowledge).

Списак цитата:

Рад 2.1.1. Edina H. Avdović, Dejan Milenković, Jasmina M. Dimitrić Marković, Jelena Đorović, Nenad Vuković, Milena D. Vukić, Verica V. Jevtić, Srećko R. Trifunović, Ivan Potočňák, Zoran Marković, *Synthesis, spectroscopic characterization (FT-IR, FT-Raman, and NMR), quantum chemical studies and molecular docking of 3-(1-(phenylamino)ethylidene)-chroman-2,4-dione*, *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 195 (2018) 31–40.

Цитиран је у:

1. T. Harit, M. Dahmani, S. Gaamouche, F. Malek, M. Dusek, A. Manseri, A. Asehrou, B. El bali, *New bipyrazolic compounds: Synthesis, characterization, antibacterial activity and computational studies*, *Journal of Molecular Structure* 1176 (2019)110-116, DOI: 10.1016/j.molstruc.2018.08.073.
2. G. Dikmen, D. Hür, *Palladium (II) complex: Synthesis, spectroscopic studies and DFT calculations* *Chemical Physics Letters*, 716 (2019) 49-60. DOI: 10.1016/j.cplett.2018.12.018.

Рад 2.2.1. Edina H. Avdović, Danijela LJ. Stojković, Verica V. Jevtić, Milica Kosić, Biljana Ristić, Ljubica Harhaji-Trajković, Milena Vukić, Nenad Vuković, Zoran S. Marković, Ivan Potočňák, Srećko R. Trifunović; *Synthesis, Characterization and Cytotoxicity of a new Palladium(II) Complex with a Coumarin-Derived ligand 3-(1-(3-hydroxypropylamino) ethylidene) chroman-2,4-dione. Crystal structure of the 3-(1-(3-hydroxypropylamino) ethylidene) chroman-2,4-dione*; *Inorganica Chimica Acta*, 466 (2017) 188–196, IF2017=2,264, ISSN: 0020-169, DOI: 10.1016/j.ica.2017.06.015

Цитиран је у:

1. A. Olyaei, S. Javarsineh, M. Sadeghpour, *Green synthesis and Z/E-isomerization of novel coumarin enamines induced by organic solvents*, *Chemistry of heterocyclic compounds*, 54 (2018) 934-939, DOI: 10.1007/s10593-018-2376-x.

Рад 2.2.2. Edina H. Avdović, Dejan Milenković, Jasmina M. Dimitrić-Marković, Nenad Vuković, Srećko R. Trifunović and Zoran S. Marković; *Structural, spectral and NBO analysis of 3-(1-(3-hydroxypropylamino) ethylidene) chroman-2,4-dione*; *Journal of Molecular*

Structure, 1147 (2017) 69-75, IF2017=2,011, ISSN: 0022-2860, DOI: 10.1016/j.molstruc.2017.06.094.

Цитиран је у:

1. S.M.B.H. Ghazvini, P. Safari, A. Mobinikhaledi, H. Moghanian, H. Rasouli, *Synthesis, characterization, anti-diabetic potential and DFT studies of 7-hydroxy-4-methyl-2-oxo-2H-chromene-8-carbaldehyde oxime*, *Spectrochimica acta part a-molecular and biomolecular spectroscopy*, 205(2018) 111-131, DOI: 10.1016/j.saa.2018.07.009.
 2. A. Saeed, M. Arif, M.F. Erben, U. Florke, J. Simpson, *One-pot synthesis, quantum chemical calculations and X-ray diffraction studies of thiazolyl-coumarin hybrid compounds*, *Spectrochimica acta part a-molecular and biomolecular spectroscopy*, 198(2018) 290-296 DOI: 10.1016/j.saa.2018.03.
 3. 3.N. Yildirim, N. Demir, G. Alpaslan, B. Boyacioglu, M. Yildiz, H. Unver, *DFT calculation, biological activity, anion sensing studies and crystal structure of (E)-4-chloro-2-[(pyridin-2-ylimino)-methylphenol]*, *Journal of the serbian chemical*, 83(2018) 707-721, DOI: 10.2298/JSC171001009Y.
- Рад 2.2.3.** D. Milenković, J. Đorović, S. Jeremić, J. M. Dimitrić Marković, **E. H. Avdović**, Z. Marković; *Free radical scavenging potency of dihydroxybenzoic acids*; *Journal of Chemistry*, 2017 (2017) 1–9, IF2017= 1,726, ISSN: 0973-4945, DOI: 10.1155/2017/5936239.

Цитиран је у:

1. M.N.H. Daud, A. Wibowo, N. Abdullah, R. Ahmad, *Bioassay-guided fractionation of Artocarpus heterophyllus L. J33 variety fruit waste extract and identification of its antioxidant constituents by TOF-LCMS*, *Food chemistry*, 266(2018) 200-214, DOI: 10.1016/j.foodchem.2018.05.120.
2. Z. Markovic, M. Filipovic, N. Manojlovic, A. Amic, S. Jeremic, D. Milenkovic, *QSAR of the free radical scavenging potency of selected hydroxyanthraquinones*, *Chemical papers*, 72(2018) 2785-2793, DOI: 10.1007/s11696-018-0534-3.
3. M. Kalinowska, L. Mazur, A. Jablonska-Trypuc, W. Lewandowski, *A new calcium 2,5-dihydroxybenzoate: Synthesis, characterization and antioxidant studies and stress mediated cytotoxicity in MCF-7 cells*, *Journal of saudi chemical society*, 22(2018) 742-756, DOI: 10.1016/j.jscs.2017.12.006.
4. R. Cervellati, E. Greco, S.M. Blagojevic, S.N. Blagojevic, S. Anic, Z.D.Cupic, *Experimental and mechanistic study of the inhibitory effects by phenolics on the oscillations of the OrbA n-*

- Epstein Reaction, Reaction kinetics mechanisms and catalysis*, 123(2018)125-139, DOI: 10.1007/s11144-017-1306-8.
5. D.S. Dimic, D.A. Milenkovic, J.M.D. Markovic, Z.S. Markovic, *Thermodynamic and kinetic analysis of the reaction between biological catecholamines and chlorinated methylperoxy radicals*, *Molecular physics*, 116(2018)1166-1178 DOI: 10.1080/00268976.2017.1414967.
 6. M.K. Ediriweera, K.H. Tennekoon, S.R. Samarakoon, *A Review on Ethnopharmacological Applications, Pharmacological Activities, and Bioactive Compounds of Mangifera indica (Mango)*, *Evidence-based complementary and alternative medicine article*, 2017, DOI: 10.1155/2017/6949835.
 7. A. Galano, J. Raúl Alvarez-Idaboy, *Computational strategies for predicting free radical scavengers' protection against oxidative stress: Where are we and what might follow?* *International Journal of Quantum Chemistry*, 119 (2) (2019), DOI: 10.1002/qua.25665.
- Рад 2.3.1.** Dejan Milenković, Jelena Đorović, Vladimir Petrović, **Edina H. Avdović** and Zoran Marković; *Hydrogen atom transfer versus proton coupled electron transfer mechanism of gallic acid with different peroxy radicals*. *Reac Kinet Mech Cat.* 123 (2018) 215-230, IF2017=1,515, ISSN: 1878-5190, DOI 10.1007/s11144-017-1286-8.

Цитиран је у:

1. Z. Markovic, M. Filipovic, N. Manojlovic, A. Amic, S. Jeremic, D. Milenkovic, *QSAR of the free radical scavenging potency of selected hydroxyanthraquinones*, *Chemical papers*, 72(2018) 2785-2793 DOI: 10.1007/s11696-018-0534-3
2. P.P. Lu, Z.F. Ni, G.M. Chen, S.H. Qian, *The Influence of SBF on Surface Properties of Irradiated GO/UHMWPE Nanocomposites*, *Russian journal of applied chemistry*, 91(2018)1172-1178 DOI: 10.1134/S1070427218070169.
3. L. Lespade, *Ab initio molecular dynamics of electron transfer from gallic acid to small radicals: A comparative study between hydroxyl and nitrogen dioxide radicals*, *Computational and theoretical chemistry*, 1135(2018) 6-10 DOI: 10.1016/j.comptc.2018.05.002.
4. J. Tosovic, S. Markovic, *Reactivity of chlorogenic acid toward hydroxyl and methyl peroxy radicals relative to trolox in nonpolar media*, *Theoretical chemistry accounts*, 137(2018)76, DOI: 10.1007/s00214-018-2251-y.
5. Title: Author(s): A. Galano, J.R. Alvarez-Idaboy, *Computational strategies for predicting free radical scavengers' protection against oxidative stress: Where are we and what might follow?* *International journal of quantum chemistry*, 119(2019) DOI: 10.1002/qua.25665

Д. Мишљење и предлог комисије

Научни допринос др Едине Авдовић огледа се у синтези и карактеризацији нових деривата кумарина и одговарајућих паладијум(II) комплекса, као и бољем разумевању утицаја промене структуре лиганата на биолошку активност како лиганата тако и одговарајућих паладијум(II) комплекса. Најбољу биолошку активност показују деривати кумарина чији супституент у положају 3 садржи хидроксифенил групе, као и њихови одговарајући паладијум(II) комплекси. Овим сазнањима стварају се могућности за даља истраживања у овој области. Применом компјутерских симулационих метода испитивано је понашање новосинтетисаних једињења према биолошки значајним молекулима. Добијени резултати указују на реалну могућност следеће фазе преклиничких испитивања неких новосинтетисаних једињења. Резултати свих истраживања су приказани тако да се могу поновити у било којој органометалној лабораторији, углавном употребом доступне и једноставне опреме.

Др Едина Авдовић је до сада објавила осам научних радова у признатим часописима од међународног значаја (два рада из категорије **M21**, четири рада из категорије **M22** и два рада из категорије **M23**) по четири саопштења на међународним конференцијама штампана у целини и у изводу (**M33** и **M34**), два саопштења на домаћим конференцијама штампана у целини (**M63**) и осам саопштења на домаћим конференцијама штампана у изводу (**M64**). Укупна вредност фактора М за до сада постигнуте резултате износи **56,6**, док нормирани М фактор износи **42,3**. Укупна вредност импакт фактора (IF) објављених научних радова је **16,825**. Имајући у виду целокупне научне резултате др Едине Авдовић, њену научну компетентност за избор у звање научни сарадник карактеришу следеће вредности индикатора:

Ознака групе	Укупан број радова	Вредност индикатора	Укупна вредност/*нормирана вредност
M ₂₁	2	8	16/*10
M ₂₂	4	5	20/*14
M ₂₃	2	3	6/*4
M ₃₃	4	1	4
M ₃₄	4	0,5	2
M ₆₃	2	0,5	1/*0,91
M ₆₄	8	0,2	1,6/*1,39
M ₇₁	1	6	6

Укупни поени /*нормирани поени: **56,6/*42,3**

КРИТЕРИЈУМИ ЗА ИЗБОР У НАУЧНО ЗВАЊЕ НАУЧНИ САРАДНИК

Потребан услов	Остварено (Нормирано)
Укупно: 16	Укупно: 56,6 (42,3)
$M_{10}+M_{20}+M_{31}+M_{32}+M_{33}+M_{41}+M_{42} \geq 10$	$M_{10}+M_{20}+M_{31}+M_{32}+M_{33}+M_{41}+M_{42} = 46$ (32)
$M_{11}+M_{12}+M_{21}+M_{22}+M_{23}+M_{24} \geq 5$	$M_{11}+M_{12}+M_{21}+M_{22}+M_{23}+M_{24} = 42$ (28)

На основу свега изложеног може се закључити:

Б. Закључак

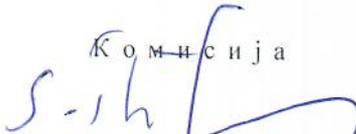
На основу анализе приложене документације, може се закључити да је др Едина Авдовић својим досадашњим научноистраживачким радом дала значајан оригинални научни допринос у области органометалне хемије. Постигнути научни резултати су од значаја за синтезу нових деривата кумарина и одговарајућих паладијум(II) комплекса који могу бити од интереса за медицину у смислу примене као потенцијалних антитуморских и антимикробних агенаса. У прилог томе говоре резултати испитиваних биолошких својстава синтетисаних лиганада и комплекса у *in vitro* условима. Одбранила је докторску дисертацију из области неорганске хемије и до сада је објавила осам научних радова у познатим часописима међународног значаја (два рада из категорије **M21**, четири рада из категорије **M22** и два рада из категорије **M23**) чија је цитираност 18 (без аутоцитата), по четири саопштења на међународним конференцијама штампана у целини и у изводу (**M33** и **M34**), два саопштења на домаћим конференцијама штампана у целини и осам саопштења на домаћим конференцијама штампана у изводу (**M64**).

Имајући у виду целокупне научне резултате др Едине Авдовић, њену научну компетентност за избор у звање *научни сарадник за научну област Хемија* карактерише укупна вредност М фактора од **56,6**, док нормирани М фактор износи **42,3**. Укупна вредност импакт фактора (IF) објављених научних радова је **16,825**. Показала је изузетан смисао и способност за самостално бављење научно-истраживачким радом у области неорганске хемије. Поред тога, др Едина Авдовић је показала смисао да стечено знање са успехом преноси на студенте и млађе колеге. На основу претходно изнетих чињеница, а у складу са **Законом о научноистраживачкој делатности** може се закључити да је др Едина Авдовић, испунила све услове за избор у звање *научни сарадник за научну област Хемија*.

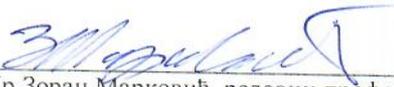
Сходно томе, комисија са задовољством предлаже Наставно-научном већу Природно-математичког факултета у Крагујевцу да прихвати предлог за избор кандидата др Едине Авдовић у научно звање *научни сарадник за научну област Хемија* и упути га надлежној комисији Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије.

У Крагујевцу
05.02.2019. год.

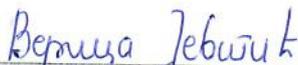
К о м и с и ј а



-
1. Др Срећко Трифуновић, редовни професор (председник комисије)
Природно-математички факултет, Крагујевац
Ужа научна област: Неорганска хемија



-
2. Др Зоран Марковић, редовни професор
Департман за хемијско-технолошке науке, Нови Пазар
Ужа научна област: Органска хемија



-
3. Др Верица Јевтић, ванредни професор
Природно-математички факултет, Крагујевац
Ужа научна област: Неорганска хемија