

05.12.2019.  
03 680/5 - -

Имајући сега  
Ј. Душица

## НАСТАВНО-НАУЧНОМ ВЕЋУ ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКОГ ФАКУЛТЕТА У КРАГУЈЕВЦУ

На седници Наставно-научног већа Природно-математичког факултета у Крагујевцу одржаној 13. 11. 2019. године (одлука број: 600/XV-1) одређени смо у Комисију за писање извештаја о испуњености услова др Душице Симијонових, научног сарадника у Институту за хемију Природно-математичког факултета, за стицање научног звања *виши 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* Министарства просвете, науке и технолошког развоја („Службени гласник РС”, бр. 24/2016 и 21/2017), а у складу са чланом 76 *Закона о науци и истраживањима* („Службени гласник РС”, бр. 49/2019), подносимо Наставно-научном већу следећи

### ИЗВЕШТАЈ

#### I Биографија

Др Душица Симијонових је рођена 18. 03. 1982. године у Јагодини. Основну школу је завршила у Колару, а гимназију, природно-математички смер, у Јагодини. Студије хемије, смер за истраживање и развој, на Природно-математичком факултету у Крагујевцу уписала је школске 2001/02. године где је и дипломирала 2007. године са просечном оценом 9,14. Последипломске (докторске академске) студије, смер - органска хемија, уписала је школске 2007/2008. године на истом факултету, где је 2. 06. 2014. године одбранила докторску дисертацију под називом ”Деривати етаноламина као јонске течности и прекурсори биолошки и каталитички активних Pd(II)-комплекса”.

Др Душица Симијонових је у периоду од јануара 2008. године до октобра 2009. године била ангажована на пројекту као стипендиста Министарства просвете, науке и технолошког развоја, а од 1. 11. 2009. године примљена је као истраживач приправник у радни однос на Природно-математичком факултету у Крагујевцу. До сада је учествовала у реализацији следећих пројеката Министарства просвете, науке и технолошког развоја (НИО-Природно-математички факултет, Крагујевац):

а) Пројекат број: 142013Б „Биоактивни комплекси *p*- и *d*-јона метала са лигандима фармакотерапијског значаја“ (период ангажовања 2009-2010; руководилац пројекта проф. др Предраг Ђурђевић);

б) Пројекат број: 172016 „Синтеза, моделовање, физичко-хемијске и биолошке особине органских једињења и одговарајућих комплекса метала“ (период ангажовања 2011 -; руководилац пројекта проф. др Срећко Трифуновић).

в) Билатерални пројекат са Републиком Хрватском: „Испитивање хемизма и антиоксидативне активности комплекса полифенолних једињења са есенцијалним металима“ (период ангажовања 2016-2017; руководиоци: проф. др Светлана Марковић и др Анте Миличевић).

У звање истраживач сарадник изабрана је 16. 02. 2011. године на Природно-математичком факултету у Крагујевцу, а у звање научни сарадник 29. 04. 2015. године на Природно-математичком факултету у Крагујевцу.

У оквиру постдокторског усавршавања у периоду од 1. 09. 2016. године до 1. 03. 2017. године, др Душица Симијонович је као стипендиста Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије провела шест месеци на Аристотеловом Универзитету у Солуну, на Департману за органску хемију, у истраживачкој групи професора Константиноса Литинаса где се бавила синтезом биолошки активних кумаринских и фталазинских деривата.

Од 2. 09. 2019. године запослена је као научни сарадник у Институту за информационе технологије, Крагујевац.

Научно-истраживачки рад кандидата обухвата област органске и биоорганске хемије. Предмет тих истраживања је синтеза етаноламинских јонских течности и њихова примена као катализатора, лигананда и растварача у области „зелене органске хемије“. Актуелна научна истраживања кандидата обухватају синтезе различитих азотних хетероцикличних, фенолних и полифенолних једињења, које се углавном реализују применом „алата зелене органске синтезе“, структурну карактеризацију добијених једињења, изучавање механизма њиховог настајања, као и испитивање њихове антиоксидативне и антиинфламаторне активности.

Резултати досадашњег научно-истраживачког рада публиковани су у укупно двадесет осам научних радова (осам радова из категорије **M21**, четрнаест радова из категорије **M22** и шест радова из категорије **M23**) и већег броја саопштења на међународним и националним научним конференцијама. Коаутор је уџбеника Биоорганска хемија-практикум (ISBN 978-86-6009-031-9).

## II Библиографија

### Научни радови публиковани у врхунским часописима међународног значаја (M21)

1. Z. D. Petrović, V. P. Petrović, **D. Simijonović**, S. Marković  
Mechanistic pathways for oxidative addition of aryl iodides to the low-ligated diethanolamine palladium(0) complex in phosphine-free Heck reactions  
*Journal of Organometallic Chemistry*, **694**, 2009, 3852-3858  
ISSN 0022-328X

**M21**, IF = 2,168, 12/43 (2007) (област: Chemistry, Inorganic & Nuclear)  
Број хетероцитата: 10

2. Z. D. Petrović, **D. Simijonović**, V. P. Petrović, S. Marković  
Diethanolamine and *N,N*-diethylethanolamine ionic liquids as precatalyst-precursors and reaction media in green Heck reaction protocol  
*Journal of Molecular Catalysis A: Chemical*, **327**, 2010, 45-50  
ISSN 1381-1169  
**M21**, IF = 3,135, 36/121 (2009) (област: Chemistry, Physical)  
Број хетероцитата: 16
3. Z. D. Petrović, V. P. Petrović, **D. Simijonović**, S. Marković  
Insight into hydrolytic reaction of *N*-acetylated L-histidylglycine dipeptide with novel mechlorethamine platinum(II) complex. NMR and DFT study of the hydrolytic reaction  
*Dalton Transactions*, **40**, 2011, 9284-9288  
ISSN 1477-9226  
**M21**, IF = 4,081, 7/44 (2009) (област: Chemistry, Inorganic & Nuclear)  
Број хетероцитата: 2
4. V. P. Petrović, **D. Simijonović**, M. N. Živanović, J. V. Košarić, Z. D. Petrović, S. Marković, S. D. Marković  
Vanillic Mannich bases: synthesis and screening of biological activity. Mechanistic insight into the reaction with 4-chloroaniline  
*RSC Advances*, **4**, 2014, 24635-24644  
ISSN 2046-2069  
**M21**, IF = 3,840, 33/157 (2014) (област: Chemistry, Multidisciplinary)  
Број хетероцитата: 11

---

\* **Након избора у звање научни сарадник**

- 5.\* Z. D. Petrović, J. Đorović, **D. Simijonović**, V. P. Petrović, Z. Marković  
Experimental and theoretical study of antioxidative properties of some salicylaldehyde and vanillic Schiff bases.  
*RSC Advances*, **5**, 2015, 24094-24100  
ISSN 2046-2069  
**M21**, IF = 3,840, 33/157 (2014) (област: Chemistry, Multidisciplinary)  
Број хетероцитата: 14
- 6.\* V. P. Petrović, M. N. Živanović, **D. Simijonović**, J. Đorović, Z. D. Petrović, S. D. Marković  
Chelate *N,O*-palladium(II) complexes: synthesis, characterization and biological activity.  
*RSC Advances*, **5**, 2015, 86274-86281

ISSN 2046-2069

**M21**, IF = 3,840, 33/157 (2014) (област: Chemistry, Multidisciplinary)

Број хетероцитата: 3

- 7.\* V. P. Petrović, **D. Simijonović**, V. M. Milovanović, Z. D. Petrović  
Acetophenone Mannich bases: study of ionic liquid catalysed synthesis and antioxidative potential of products  
*Royal Society Open Science*, **5**, 2018, 181232-181243  
ISSN 2054-5703  
**M21**, IF = 2,504, 17/64 (2017) (област: Multidisciplinary Sciences)  
Број хетероцитата: 1
- 8.\* **D. Simijonović**, E. -E. Vlachou, Z. D. Petrović, D. J. Hadjipavlou-Litina, K. E. Litinas, N. Stanković, N. Mihović, M. P. Mladenović  
Dicoumarol derivatives: Green synthesis and molecular modelling studies of their anti-LOX activity  
*Bioorganic Chemistry*, **80**, 2018, 741-752  
ISSN 0045-2068  
**M21**, IF = 3,929, 12/57 (2017) (област: Chemistry, Organic)  
Број хетероцитата: 0

**Научни радови публиковани у истакнутим часописима међународног значаја (M22)**

9. Z. D. Petrović, S. Marković, **D. Simijonović**, V. Petrović  
Mechanistic insight into preactivation of a modern palladium catalyst precursor in phosphine-free Heck reactions  
*Monatshefte Fur Chemie*, **140**, 2009, 371-374  
ISSN 0026-9247  
**M22**, IF = 1,426, 57/127 (2008) (област: Chemistry, Multidisciplinary)  
Број хетероцитата: 3
10. Z. D. Petrović, D. Hadjipavlou-Litina, E. Pontiki, **D. Simijonović**, V. P. Petrović  
Diethanolamine Pd(II) complexes in bioorganic modeling as model systems of metallopeptidases and soybean lipoxygenase inhibitors  
*Bioorganic Chemistry*, **37**, 2009, 162-166  
ISSN 0045-2068  
**M22**, IF = 2,125, 26/56 (2007) (област: Chemistry, Organic)  
Број хетероцитата: 5
11. A. T. Balaban, I. Gutman, S. Marković, **D. Simijonović**  
Local aromaticity in benzo- and benzocyclobutadieno-annelated anthracenes  
*Monatshefte Fur Chemie*, **142**, 2011, 797-800  
ISSN 0026-9247  
**M22**, IF = 1,532, 69/154 (2011) (област: Chemistry, Multidisciplinary)  
Број хетероцитата: 4

12. Z. D. Petrović, S. Marković, V. P. Petrović, **D. Simijonović**  
Triethanolammonium acetate as a multifunctional ionic liquid in the palladium-catalyzed green Heck reaction  
*Journal of Molecular Modeling*, **18**, 2012, 433-440  
ISSN 1610-2940  
**M22**, IF = 1,984, 56/152 (2012) (област: Chemistry, Multidisciplinary)  
Број хетероцитата: 7
  
  13. Z. D. Petrović, V. P. Petrović, **D. Simijonović**, S. Marković  
Stereoselective homogeneous catalytic arylation of methyl methacrylate: Experimental and computational study  
*Journal of Molecular Catalysis A: Chemical*, **356**, 2012, 144-151.  
ISSN 1381-1169  
**M22**, IF = 3,187, 43/135 (2012) (област: Chemistry, Physical)  
Број хетероцитата: 3
  
  14. T. Perić, V. Lj. Jakovljević, V. Zivković, J. Krkeljić, Z. D. Petrović, **D. Simijonović**, S. Novokmet, D. M. Djurić, S. M. Janković  
Toxic Effects of Palladium Compounds on the Isolated Rat Heart  
*Medicinal Chemistry*, **8**, 2012, 9-13  
ISSN 1573-4064  
**M22**, IF = 1,603, 27/54, (2010) (област: Chemistry, Medicinal)  
Број хетероцитата: 5
  
  15. I. Radojević, Z. D. Petrović, Lj. Čomić, **D. Simijonović**, V. P. Petrović  
Biological evaluation of mechlorethamine-Pt(II) complex, part II: Antimicrobial screening and LOX study of the complex and its ligand  
*Medicinal Chemistry*, **8**, 2012, 947-952  
ISSN 1573-4064  
**M22**, IF = 1,603, 27/54 (2010) (област: Chemistry, Medicinal)  
Број хетероцитата: 4
  
  16. **D. Simijonović**, Z. D. Petrović, V. P. Petrović  
Some physico-chemical properties of ethanolamine ionic liquids: Behavior indifferent solvents  
*Journal of Molecular Liquids*, **179**, 2013, 98-103  
ISSN 0167-7322  
**M22**, IF = 2,083, 75/136 (2013) (област: Chemistry, Physical)  
Број хетероцитата: 5
-

\* **Након избора у звање научни сарадник**

- 17.\* Z. Marković, J. Đorović, Z. D. Petrović, V. P. Petrović, **D. Simijonović**  
Investigation of the antioxidant and radical scavenging activities of some phenolic Schiff bases with different free radicals.  
*Journal of Molecular Modeling*, 21, 2015, 293  
ISSN 1610-2940  
**M22**, IF = 1,867, 61/148 (2013) (област: Chemistry, Multidisciplinary)  
Број хетероцитата: 5
- 18.\* V. P. Petrović, **D. Simijonović**, Z. D. Petrović, S. Marković  
Formation of a vanillic Mannich base – theoretical study.  
*Chemical Papers*, 69, 2015, 1244-1252  
ISSN 0366-6352  
**M22**, IF = 1,468, 79/157 (2014) (област: Chemistry, Multidisciplinary)  
Број хетероцитата: 0
- 19.\* J. Đorović, Z. Marković, Z. D. Petrović, **D. Simijonović**, V. P. Petrović  
Theoretical analysis of the experimental UV-Vis absorption spectra of some phenolic Schiff bases  
*Molecular Physics*, 115, 2017, 2460-2468  
ISSN 0026-8976  
**M22**, IF = 1,870, 87/146 (2016) (област: Chemistry, Physical)  
Број хетероцитата: 2
- 20.\* V. P. Petrović, M. N. Živanović, **D. Simijonović**, J. Đorović, Z. D. Petrović, S. D. Marković  
Study of the structure, prooxidative, and cytotoxic activity of some chelate copper(II) complexes  
*Chemical Papers*, 71, 2017, 2075-2083  
ISSN 0366-6352  
**M22**, IF = 1,326, 97/163 (2015) (област: Chemistry, Multidisciplinary)  
Број хетероцитата: 1
- 21.\* **D. Simijonović**, Z. D. Petrović, V. M. Milovanović, V. P. Petrović, G. A. Bogdanović,  
A new efficient domino approach for the synthesis of pyrazolyl-phthalazine-diones. Antiradical activity of novel phenolic products  
*RSC Advances*, 8, 2018, 16663-16673  
ISSN 2046-2069  
**M22**, IF = 3,108, 59/166 (2016) (област: Chemistry, Multidisciplinary)  
Број хетероцитата: 1
- 22.\* V. Milovanović, Z. D. Petrović, S. Novaković, G. A. Bogdanović, **D. Simijonović**, Petrović V.P.

Structural characterization of benzoyl-1*H*-pyrazole derivatives obtained in lemon juice medium: Experimental and theoretical approach

*Journal of Molecular Structure*, 1195, 2019, 85-94

ISSN 0022-2860

**M22**, IF = 2,011, 86/147 (2017) (област: Chemistry, Physical)

Број хетероцитата: 0

### Научни радови публиковани у међународним часописима (M23)

23. A. T. Balaban, I. Gutman, S. Marković, **D. Simijonović**, J. Đurđević  
Local Aromaticity in Benzo and Benzocyclobutadieno-Annulated Phenanthrenes  
*Polycyclic Aromatic Compounds*, **31**, 2011, 339-349  
ISSN 1040-6638  
**M23**, IF = 1,023, 39/56 (2011) (област: Chemistry, Organic)  
Број хетероцитата: 2
24. Z. D. Petrović, Lj. Čomić, O. Stevanović, **D. Simijonović**, V. P. Petrović  
Antimicrobial activity of the ionic liquids triethanolamine acetate and diethanolamine chloride, and their corresponding Pd(II) complexes  
*Journal of Molecular Liquids*, **170**, 2012, 61-65  
ISSN 0167-7322  
**M23**, IF = 1,684, 83/135 (2012) (област: Chemistry, Physical)  
Број хетероцитата: 12
25. V. P. Petrović, **D. Simijonović**, Z. D. Petrović  
Use of diethanolammonium–tetrachloridopalladate(II) complex in bioorganic modelling as artificial metallopeptidase in the reaction with *N*-acetylated *L*-methionylglycine dipeptide. NMR and DFT study of the hydrolytic reaction  
*Journal of Molecular Structure*, **1060**, 2014, 38-41  
ISSN 0022-2860  
**M23**, IF = 1,602, 92/139 (2014) (област: Chemistry, Physical)  
Број хетероцитата: 4

---

#### \* Након избора у звање научни сарадник

- 26.\* V. P. Petrović, **D. Simijonović**, S. B. Novaković, G. A. Bogdanović, S. Marković, Z. D. Petrović  
Structural characterisation of some vanillic Mannich bases: Experimental and theoretical study.  
*Journal of Molecular Structure*, **1098**, 2015, 34-40  
ISSN 0022-2860

**M23**, IF = 1,780, 94/144 (2015) (област: Chemistry, Physical)

Број хетероцитата: 1

- 27.\* Z. D. Petrović, **D. Simijonović**, J. Đorović, V. Milovanović, Z. Marković, V. P. Petrović  
One-Pot Synthesis of Tetrahydropyridine Derivatives: Liquid Salt Catalyst vs Glycolic  
Acid Promoter. Structure and Antiradical Activity of the New Products

*ChemistrySelect*, 2, 2017, 11187-11194

ISSN 2365-6549

**M23**, IF = 1,505, 106/171 (2017) (област: Chemistry, Multidisciplinary)

Број хетероцитата: 1

- 28.\* Z. D. Petrović, J. Đorović, **D. Simijonović**, S. Trifunović, V. P. Petrović  
*In vitro* study of iron coordination properties, anti-inflammatory potential, and cytotoxic  
effects of *N*-salicylidene and *N*-vanillidene anil Schiff bases

*Chemical Papers*, 72, 2018, 2171-2180

ISSN 0366-6352

**M23**, IF = 1,258, 110/166 (2016) (област: Chemistry, Multidisciplinary)

Број хетероцитата: 1

**Напомена:** Научни радови под редним бројем 5\* - 8\*, 17\* - 22\* и 26\* - 28\* (укупно 13) су објављени након Одлуке о утврђивању предлога за стицање звања научни сарадник Наставно-научног већа Природно-математичког факултета у Крагујевцу од 02. 10. 2014. године број 890/V-1 (Доказ дат у Прилогу), и они подлежу оцењивању за избор у звање виши научни сарадник.

**Саопштења са међународних скупова штампана у целини (M33)**

---

**\*Након избора у звање научни сарадник**

- 29.\* **D. Simijonović**, Z. D. Petrović, I. D. Radojević, Lj. R. Čomić, V. P. Petrović, V. Milovanović,

Antimicrobial activity of substituted pyrazoles,

ISER 210<sup>th</sup> International Conference, Florence, Italy, 19-20 July, 2019, Book of abstracts pp. 19-23.

ISBN: 987-93-88786-14-0

- 30.\* V. M. Milovanović, Z. D. Petrović, **D. Simijonović**, V. P. Petrović, J. Branković,  
Antioxidant activity of chromeno-pyrimidine fused heterocycles obtained in green  
reaction,

ISER 210<sup>th</sup> International Conference, Florence, Italy, 19-20 July 2019, Book of abstracts pp. 15-18.

ISBN: 987-93-88786-14-0

**Саопштења са међународних скупова штампана у изводу (M34)**

31. Z. D. Petrović, **D. Simijonović**, V. P. Petrović  
Diethanolamine: an useful ligand, base and reaction medium for phosphine-free Pd-catalyzed Heck reactions  
20<sup>th</sup> Congress of the Society of Chemists and Technologists of Macedonia, Ohrid, Macedonia, September 17-20, 2008, Book of Abstracts, SOS-23-E, p. 334.  
ISBN: 978-9989-760-06-8
32. S. Marković, Z. D. Petrović, V. P. Petrović, **D. Simijonović**  
Mechanism of the preactivation process of trans[PdCl<sub>2</sub>(DEA)<sub>2</sub>] in phosphine-free Heck reaction  
Physical Chemistry, Beograd, Serbia, 2008, Book of abstracts C-18-O, p. 187.
33. **D. Simijonović**, Z. D. Petrović, M. Vukašinović, V. Kaljević, V. P. Petrović, N. Vuković  
Chemical view on walnuts from country-side of Kragujevac  
Euro Analysis, Innsbruck, Austria, September 6-10, 2009, Book of abstracts P070-A2.
34. V. P. Petrović, Z. D. Petrović, **D. Simijonović**, S. Marković  
New diethanolamine palladium(II) complex as artificial metallopeptidase and free radical scavenger  
10<sup>th</sup> International Symposium on Applied Bioinorganic Chemistry, Debrecen, Hungary, September 25-28, Book of Abstracts, p. 114.  
ISBN: 978-963-473-307-2
35. Z. Petrović, **D. Simijonović**, V. Petrović  
Diethanolammonium acetate as ionic liquid and ligand precursor in green Heck reaction protocol  
Second Humboldt conference on noncovalent interactions, Vršac, Serbia, October 22-25, 2009, Book of abstracts, p. 50.
36. Z. Petrović, D. Hadjipavlou-Litina, E. Pontiki, **D. Simijonović**, V. Petrović  
Mechlorethamine Pd(II) and Pt(II) complexes as inhibitors of soybean lipoxygenase and their antiradical activity  
14<sup>th</sup> Hellenic Symposium on Medicinal Chemistry, Thessaloniki, Greece, April 23-25, 2010, Book of abstracts, p. 85.
37. Z. D. Petrović, V. P. Petrović, S. Marković, **D. Simijonović**, D. Hadjipavlou-Litina  
Classical and non-classical alkylating agent in one. Novel Pt(II) - mechlorethamine complex as artificial metallopeptidase and soybean lipoxygenase inhibitor  
12<sup>th</sup> Tetrahedron Symposium: Challenges in Organic and Bioorganic Chemistry, Sitges, Spain, 2011, June 21-24, Book of abstracts, P1.142.

38. V. P. Petrović, **D. Simijonović**, A. Petrović  
 Mechlorethamine platinum(II) complex as an artificial metallopeptidase  
 15h Hellenic Symposium on Medicinal Chemistry, Athens, Greece, May 25-27, 2012,  
 Book of abstracts, p. 119.
39. **D. Simijonović**, V. P. Petrović, Z. D. Petrović, Lj. Čomić, O. Stefanović  
 Biological activity of the diethanolamine and triethanolamine ionic liquids and its  
 corresponding palladium(II) complexes  
 15h Hellenic Symposium on Medicinal Chemistry, Athens, Greece, May 25-27, 2012,  
 Book of abstracts, p. 123.
40. V. P. Petrović, **D. Simijonović**, Z. D. Petrović, M. Lukić  
 Antioxidant activity of some vanillic Mannich bases  
 International Conference on Hydrogen Atom Transfer iCHAT, Rome, Italy, June 22-26,  
 2014, Book of abstracts P26, p. 88.

---

**\*Након избора у звање научни сарадник**

- 41.\* **D. Simijonović**, K. E. Litinas, D. J. Hadjipavlou-Litina  
 Multicomponent reactions of phthalhydrazide, 4-hydroxycoumarin and aldehydes under  
 microwaves. Biological study of the received products  
 22<sup>th</sup> Panel. Chem. Congr., Thessaloniki, Greece, December 2-4, 2016, Book of abstracts p.  
 253.
- 42.\* V. P. Petrović, **D. Simijonović**, Z. D. Petrović, M. N. Živanović, S. D. Marković  
 Synthesis, characterization and cytotoxicity of phenolic copper(ii) complexes  
*10<sup>th</sup> Joint Meeting on Medicinal Chemistry*, Dubrovnik, Croatia, June 25-28, 2017, Book  
 of abstracts p. 198.
- 43.\* V. Milovanović, Z. Petrović, **D. Simijonović**, V. Petrović  
 Green synthesis, structure and antioxidative activity of the highly functionalized  
 tetrahydropyridines  
 International Meeting on Medicinal and Bio(in)organic Chemistry, Vrnjačka Banja,  
 Serbia, August 26-31, 2017, Book of abstracts, p. 24.

**Саопштења са националних скупова штампана у изводу (M64)**

44. Z. D. Petrović, **D. Simijonović**, V. P. Petrović  
 In vitro inhibition of soybean lipoxygenase with new Pd(II)-triethanolamine complex and  
 its precursors  
 49<sup>th</sup> Meeting of the Serbian Chemical Society, Kragujevac, Serbia, May 13-14, 2011, Book  
 of Abstracts OH22-P, p. 140.  
 ISBN: 978-86-7132-045-0

**\*Након избора у звање научни сарадник**

- 45.\* **D. Simijonović**, Z. D. Petrović, V. P. Petrović, M. N. Živanović, S. D. Marković  
Synthesis and biological activity of Pd(II)-complexes derived from salicylaldehyde-aniline Schiff bases  
52<sup>nd</sup> Meeting of the Serbian Chemical Society, Novi Sad, Serbia, May 29 - 30, 2015, Book of Abstracts OH P 3 p. 117.  
ISBN: 978-86-7132-056-6
- 46.\* **D. Simijonović**, V. P. Petrović, V. Milovanović, Z. D. Petrović  
Diastereoselective one-pot synthesis of vanillin-piperidine derivatives and investigation of their antioxidative activity  
53<sup>rd</sup> Meeting of the Serbian Chemical Society, Kragujevac, Serbia, June 10-11, 2016, Book of Abstracts OH P 21 p. 119.  
ISBN: 978-86-7132-061-0
- 47.\* V. Milovanović, **D. Simijonović**, Z. Petrović, V. P. Petrović  
Mechanistic study of three-component Mannich reaction and characterization of the products  
55<sup>th</sup> Meeting of the Serbian Chemical Society, Novi Sad, Serbia, June 8-9, 2018, Book of abstracts OH P 10, p. 98.  
ISBN: 978-86-7132-069-6

**Напомена:** Саопштења под редним бројем 29\* - 30\*, 41\* - 43\* и 45\* - 47\* (укупно 8) су публикована након Одлуке о утврђивању предлога за стицање звања научни сарадник Наставно-научног већа Природно-математичког факултета у Крагујевцу од 02. 10. 2014. године број 890/V-1 (Доказ дат у Прилогу), и она подлежу оцењивању за избор у звање виши научни сарадник.

**Докторска дисертација (M71)**

Душица Симијонових, *Деривати етаноламина као јонске течности и прекурсори биолошки и каталитички активних Pd(II)-комплекса*, Природно-математички факултет Крагујевац, Универзитет у Крагујевцу, 2014.

**Пет најзначајнијих научних радова др Душице Симијонових након избора у звање научни сарадник:**

1. (M21/8\*) **D. Simijonović**, E. -E. Vlachou, Z. D. Petrović, D. J. Hadjipavlou-Litina, K. E. Litinas, N. Stanković, N. Mihović, M. P. Mladenović,  
Dicoumarol derivatives: Green synthesis and molecular modelling studies of their anti-LOX activity  
*Bioorganic Chemistry*, **80**, 2018, 741-752

- M21**, IF = 3.929, 12/57 (2017) (област: Chemistry, Organic)
2. (M21/7\*) V. P. Petrović, **D. Simijonović**, V. M. Milovanović, Z. D. Petrović, Acetophenone Mannich bases: study of ionic liquid catalysed synthesis and antioxidative potential of products  
*Royal Society Open Science*, **5**, 2018, 181232-181243  
**M21**, IF = 2,504, 17/64 (2017) (област: Multidisciplinary Sciences)
  3. (M21/5\*) Z. D. Petrović, J. Đorović, **D. Simijonović**, V. P. Petrović, Z. Marković, Experimental and theoretical study of antioxidative properties of some salicylaldehyde and vanillic Schiff bases  
*RSC Advances*, **5**, 2015, 24094-24100  
**M21**, IF = 3,840, 33/157 (2014) (област: Chemistry, Multidisciplinary)
  4. (M22/21\*) **D. Simijonović**, Z. D. Petrović, V. M. Milovanović, V. P. Petrović, G. A. Bogdanović, A new efficient domino approach for the synthesis of pyrazolyl-phthalazine-diones. Antiradical activity of novel phenolic products  
*RSC Advances*, **8**, 2018, 16663-16673  
**M22**, IF = 3,108, 59/166 (2016) (област: Chemistry, Multidisciplinary)
  5. (M22/22\*) V. Milovanović, Z. D. Petrović, S. Novaković, G. A. Bogdanović, **D. Simijonović**, Petrović V.P. Structural characterization of benzoyl-1*H*-pyrazole derivatives obtained in lemon juice medium: Experimental and theoretical approach  
*Journal of Molecular Structure*, 1195, 2019, 85-94  
**M22**, IF = 2,011, 86/147 (2017) (област: Chemistry, Physical)

### III Приказ објављених радова (након избора у звање научни сарадник)

**M21/5\*** У овом раду испитан је антиоксидативни капацитет десет Schiff-ових база коришћењем експерименталних и теоријских техника, као и однос структуре и активности ових једињења. Сва једињења садрже анилински фрагмент, док је алдехидни део био салицилалдехидни или ванилински. За одређивање потенцијалне антиоксидативне активности ових једињења коришћен је DPPH тест, а за испитивање њихових електронских структура и пружање увида у њихове структура-активности односе коришћена је DFT студија. Такође, испитиван је и утицај положаја хидрокси, као и других присутних група на антиоксидативну активност. Могући механизам уклањања радикала одређен је у поларним (вода и метанол) и неполарним (бензен) растварачима. На основу добијених експерименталних и теоријски резултата, једињења **7** и **8** показују најбољу антиоксидативну активност.

**M21/6\*** Полазећи од салицилалдехид-анилинских Schiff-ових база као лигананда, синтетизована су четири *trans*-хелатна *N*, *O*-паладијум (II) комплекса. Њихове структуре

су објашњене коришћењем експерименталних и теоријских техника. Структуре теоријски могућих *cis* изомера су испитане DFT методом. Испитивана једињења била су подвргута одређивању биолошке активности као што су, *in vitro* цитотоксични и прооксидативни ефекти против карцинома дојке код људи MDA-MB-231, хуманог карцинома дебелог црева HCT-116 и ћелијске линије MRC-5 здравих хуманих фибробласта. Schiff-ове базе показују умерен или слаб цитотоксични ефекат. Са друге стране, комплекси **Pd-1** и **Pd-6** показују значајан цитотоксични ефекат на све три ћелијске линије, са IC<sub>50</sub> вредностима у распону од 0,6 до 17,1 μM према HCT-116 ћелијама, 7,2 до 55,6 μM према MDA-MB-231 ћелијама и 34,5 до 48,1 μM према MRC-5 ћелијама. Такође, **Pd-1** и **Pd-6** изазивају екстремни оксидативни стрес у свим третираним ћелијским линијама. У овој фази испитивања, **Pd-1** и **Pd-6** нису показали селективност према ћелијама рака, тј. такође су били цитотоксични за MRC-5 ћелије у сличном обиму. Узимајући у обзир све ове чињенице, дошло се до закључка да би даље требало испитати како најактивније супстанце утичу на врсту ћелијске смрти (апоптоски и/или некротични путеви).

**M21/7\*** Трокомпонентна Mannich-ова реакција ацетофенона или 4-јодоацетофенона са различитим супституисаним анилинама и бензалдехидом, катализована диетаноламонијум-хлорацетатом, изведена је под благим реакционим условима. Mannich-ове базе (**MB**), од којих је пет нових, добијене су у добрим до одличним приносима. Сва једињења су окарактерисана коришћењем елементне анализе, NMR и IR. Поред тога, детаљна експериментална и симулирана UV-Vis спектрална карактеризација ових једињења је овде представљена први пут. Антиоксидативни потенцијал синтетизованих **MB** процењен је *in vitro* користећи 2,2-дифенил-1-пикрил-хидразил радикала, као и термодинамичком студијом користећи методе функционала густине (DFT). Показало се да једињења са анизидинским делом испољавају умерено антиоксидативно деловање. Механизам органокатализоване Mannich-ове реакције је детаљно испитан помоћу DFT. Показало се да је механизам реакције потпомогнут успостављањем водоничних веза. Поред тога, претпоставља се да брзину укупне реакције одређује корак елиминације воде у процесу формирања иминијум јона. Ово је први детаљан приказ утицаја ове врсте катализатора на стварање иминијум јона, као кључног интермедијера целокупне реакције.

**M21/8\*** Деривати дикумарола синтетизовани су у одличним приносима у InCl<sub>3</sub> катализованим псеудо трокомпонентним реакцијама 4-хидроксикумарина са ароматичним алдехидима. Реакције су изведене у води под микроталасним зрачењем. Сва синтетизована једињења су окарактерисана NMR, IR и UV-Vis спектроскопијом, као и применом TD-DFT методе. Добијени дикумароли подвргнути су *in vitro* процени активности њихове липидне пероксидације и инхибиције сојине липоксигеназе. Показало се да пет од десет испитиваних једињења (**3e**, **3h**, **3b**, **3d**, **3f**) поседују значајан потенцијал антилипидне пероксидације (84–97%), а да једињења **3b**, **3e**, **3h** испољавају највећу инхибицију сојине липоксигеназе (LOX-Ib) (IC<sub>50</sub> = 52,5 μM) а **3i** нешто нижу активност (IC<sub>50</sub> = 55,5 μM). Биоактивне конформације најбољих LOX-Ib инхибитора су добијене

молекулским доковањем и молекулском динамиком. Показало се да унутар биоактивних конформација у активном месту LOX-Ib, најактивнија једињења формирају пирамидалну структуру направљену од два језгра 4-хидроксикумарина и централног фенил супституента. Овај облик служи као просторна баријера која спречава активност LOX-Ib  $Fe^{2+}/Fe^{3+}$  јона за генерисање координативне везе са C13 хидроксилном групом  $\alpha$ -линолеата. Важно је нагласити да најактивнија једињења **3b**, **3e**, **3h** и **3i** могу бити кандидати за даље испитивање њиховог *in vitro* и *in vivo* антиинфламаторног деловања и да резултати испитивања молекулског моделовања пружају могућност скрининга биоактивне конформације и појашњавају механизам анти- LOX активности дикумарола.

**M22/17\*** Антиоксидативна својства неких фенолних Schiff-ових база испитана су у присуству различитих реактивних врста као што су  $\cdot OH$ ,  $\cdot OOH$ ,  $(CH_2=CH-O-O\cdot)$  и  $\cdot O_2$ . У ту сврху коришћене су термодинамичке вредности,  $\Delta H_{BDE}$ ,  $\Delta H_{IP}$ , и  $\Delta H_{PA}$ . Разматрана су три могућа механизма за пренос атома водоника, усклађени пренос протона-електрона (CPET), појединачни пренос електрона након чега следи пренос протона (SET-PT) и секвенцијални губитак протона (SPLET). Ови механизми су тестирани у растварачима различите поларности. На основу добијених резултата показало се да SET-PT антиоксидативни механизам може бити доминантан механизам када Schiff-ове базе реагују са радикал катјоном, док су SPLET и CPET конкурентни механизми за интеракцију са хидрокси радикалом у свим тестираним растварачима. Испитиване Schiff-ове базе реагују са перокси радикалом преко SPLET механизма у поларним и неполарним растварачима. Супероксид анјон-радикал са овим Schiff-овим базама реагује врло споро.

**M22/18\*** „One-pot“ anti-Mannich-ова реакција, ванилина, анилина и циклохексанона, успешно је катализована јонском течношћу триетаноламонијум-хлорацетатом на собној температури. Принос добијене Mannich-ове базе био је веома добар и постигнута је одлична дијастереоселективност. Механизам реакције је испитиван коришћењем методе функционала густине. Реакција започиње нуклеофилним нападом азотовог атома анилина на карбонилну групу ванилина. Интермедијерни  $\alpha$ -амино-алкохол формиран на овај начин подлеже протоновању од стране триетаноламонијум јона дајући иминијум јон. Теоријски, добијени иминијум јон и енолни облик циклохексанона могу образовати протоновану Mannich-ову базу преко *anti* и *syn* пута. Хлорацетатни анјон спонтано преузима протон дајући коначан производ реакције *anti* 2-[фениламино-(4-хидрокси-3-метоксифенил) метил]циклохексанон (**MB-H**). *Syn* пут захтева нижу енергију активације, али *anti* пут даје термодинамички стабилнији производ, из чега проистиче да је испитивана Mannich-ова реакција термодинамички контролисана.

**M22/19\*** UV-Vis карактеристике десет фенолних Schiff-ових база испитане су применом TD-DFT („Time-dependent density functional theory“) и NBO анализе („Natural bond orbital analysis“). Прорачуни су били изведени са различитим функционалима, али се главна

дискусија односи на резултате добијене коришћењем методе B3LYP/6-311+G(d,p). Приступ базиран на локализованим молекулским орбиталама показује слично понашање за већину испитиваних једињења. НОМО („Highest occupied molecular orbital”) орбитала је делокализована преко прстена који је богатији електронима, НОМО-1 орбитала се шири преко другог прстена, док је LUMO („Lowest unoccupied molecular orbital”) орбитала смештена на имино групи. Две траке на највећим таласним дужинама одговарају НОМО→LUMO и НОМО-1→LUMO прелазима, тј. са оба А и В прстена до имино групе. Трака на најнижој таласној дужини потиче од прелаза са А прстена на А прстен или са В на В прстен. Наши резултати су у врло доброј сагласности са подацима који постоје у литератури.

**M22/20\*** Шест хелатних *N,O*-бакар(II) комплекса синтетизовано је полазећи од салицилалдехид-анилин Schiff-ових база, као лигананда. Њихова структура је објашњена помоћу експерименталних и теоријских техника. *In vitro* су одређене биолошке активности, тј. цитотоксични и прооксидативни ефекти према метастатичком карциному дојке MDA-MB231, епителијалном колоректалном карциному HCT-116 и здравој ћелијској линији плућа MRC-5. Комплекси **Cu-1**, **Cu-6**, а посебно **Cu-7** показали су значајне цитотоксичне ефекте, са IC<sub>50</sub> вредностима упоредивим са ефектима позитивне контроле CisPt. Поред тога, испитивани комплекси индуковали су екстремни оксидативни и нитрозативни стрес у свим третираним ћелијским линијама. Најизраженији ефекат примећен је на ћелијама HCT-116 и на MRC-5 ћелијама, док су ћелије MDA-MB-231 показале већу отпорност, дајући нам смер према супстанцама са специфичнијом селективношћу.

**M22/21\*** Деривати пиразол-фталазин-диона (**PPDs**) синтетизовани су у „one-pot“ вишеккомпонентној реакцији ацетилацетона, 2,3-дихидрофталазин-1,4-диона и различитих алдехида, у присуству јонске течности, у умереном до добром приносу. Добијено је шест нових **PPD**-а и одређена кристална структура за 2-ацетил-1-(4-флуорофенил)-3-метил-1*H*-пиразоло[1,2-*b*]фталазин-5,10-дион (**PPD-4**). Најинтересантнија структурна карактеристика новог једињења **PPD-4** је формирање прилично кратког интермолекуларног растојања између атома флуора једног молекула и средине суседног шесточланог хетероцикличног прстена. Ова интеракција распоређује све молекуле у паралелне супрамолекуларне ланце. Добијени UV-Vis спектри свих **PPD**-а упоређени су са симулираним спектрима добијеним помоћу TD-DFT. Сва синтетизована једињења подвргнута су процени њиховог *in vitro* антиоксидативног деловања користећи стабилан DPPH радикал. Показало се да је једињење **PPD-7** са катехолским мотивом најактивнији антиоксидант, док је **PPD-9**, са две суседне метокси групе до фенолне OH, испољило нешто нижи степен активности, али значајан антиоксидативни потенцијал. Резултати DFT термодинамичке студије су сагласни са експериментално добијеним подацима да **PPD-7** и **PPD-9** треба сматрати моћним антиоксидантима. Поред тога, теоријски добијени

результати (дисоцијација везе и енергије апстракције протона) наводе SPLET као преовладавајући механизам за уклањање радикала у поларним растварачима, а HAT у растварачима са нижом поларношћу. Са друге стране, добијене реакционе енталпије за инактивацију слободних радикала указују на конкуренцију између HAT и SPLET механизма, осим у случају  $\cdot\text{OH}$  радикала у поларним растварачима, где је HAT означен као преодминантан.

**M22/22\*** У лимуновом соку, природном и еколошки прихватљивом медијуму, изведене су једноставне, „one-pot“ реакције између ацетилацетона и различитих супституисаних бензоил-хидразида. Деривати 1-бензоил-1*H*-пиразола добијени су за кратко реакционо време и у добрим приносима, када су у реакцијама коришћени бензоил-хидриди са електрон-донорским супституентима на фенил групи. Са друге стране, бензоил хидриди са електрон-привлачним супституентима су реаговали спорије, дајући смешу 1-бензоил-5-хидрокси-4,5-дихидро-1*H*-пиразола и 1-бензоил-1*H*-пиразола. Важно је нагласити да су два производа, (2-хлорфенил)(4,5-дихидро-5-хидрокси-3,5-диметилпиразол-1-ил)метанон и (4-јодфенил)(3,5-диметил-1*H*-пиразол-1-ил)метанон, приказана овде први пут. Сва добијена једињења су окарактерисана коришћењем IR, UV-Vis и NMR, експериментално и теоретски, као и са тачкама топљења. Оставарена је добра сагласност између експерименталних и симулираних IR, UV-Vis,  $^1\text{H}$  and  $^{13}\text{C}$  NMR спектра. Поред тога, одређене су кристална структура и Hirshfeld-ова анализа површина за једињење (4,5-дихидро-5-хидрокси-3,5-диметилпиразол-1-ил)(4-јодфенил)метанон.

**M23/26\*** У овом раду је приказана синтеза и одређивање структуре 2-[(4-флуорофениламино)-(4-хидрокси-3-метоксифенил)метил]циклохексанона (**MB-F**). Да би се одредила структура овог новог једињења урађена је експериментална и теоријска IR и NMR спектрална карактеризација. Симулација спектралних података извршена је коришћењем три методе: B3LYP, B3LYP-D2 и M06-2X. Резултати добијени за **MB-F** упоређени су са резултатима добијеним за слично, познато једињење 2-[фениламино-(4-хидрокси-3-метоксифенил)метил]циклохексанон (**MB-H**), чија је кристална структура представљена овде. Узимајући у обзир све експерименталне и теоријске резултате, предложена је структура **MB-F**-а.

**M23/27\*** Диетаноламонијум-хидрогенисулфат (**DHS**), као течна со, и гликолна киселина (**GA**) коришћени су за синтезу високо функционализованих тетрахидропиридина (**THP**). Због једноставности реакционог поступка, одличне дијастереоселективности и регенерације катализатора ови зелени протоколи могу се разматрати као атрактиван приступ за добијање **THP**-а. За разлику од бројних приказаних реакција за синтезу **THP**-а које трају сатима и уз загревање, реакције изведене у присуству **GA** углавном се завршавају за сат времена и на собној температури. Као побољшање у односу на друге органокатализоване реакције за синтезу **THP**-а са умереним приносима, овај протокол

обезбеђује добре до одличне приносе. Применом ових поступака остварена је синтеза три нова ванилинска једињења. Структуре ових једињења расветљене су на основу експерименталних и теоријских података (IR,  $^1\text{H}$  NMR,  $^{13}\text{C}$  NMR, NOESY, UV-Vis и DFT). Процена антиоксидативне активности остварена је експериментално и теоријски. DFT термодинамички параметри у сагласности са експериментално добијеним резултатима указују на то да ново синтетизовани **ТНР** заслужују значајну пажњу као моћни антиоксиданти.

**M23/28\*** *N*-салицилиден- и *N*-ванилиден-анил Schiff-ове базе **SB-1–5** употребљене су за испитивање њихове координационе способности са гвожђем. У ту сврху изведене су реакције са Fe(III)-хлоридом. Добивени резултати показали су да међу испитиваним Schiff-овим базама, салицилалдехидне базе **SB-1** и **SB-2**, испољавају најбољу координативну способност. Одговарајући комплекси добијени су у добром приносу и испитивани су помоћу UV-Vis спектрофотометрије и IR спектроскопије. Такође је тестиран инхибиторни потенцијал **SB-1–5** према ензиму липоксигенази (LOX) који садржи гвожђе. Салицилиденске базе су имале бољу активност него ванилиденске. Одређене су цитотоксичне *in vitro* активности према хуманом карциному дојке MDA-MB-231 и ћелијским линијама хуманог карцинома дебелог црева HCT-116. На основу ових резултата **SB-1** и **SB-2** могу се сматрати занимљивим једињењима за даље *in vivo* истраживање.

#### IV Квалитативна оцена научног доприноса

##### *Оригиналност научног рада*

Мултидисциплинарна истраживања, кандидата др Душице Симијонових, која су представљена у овом извештају, дају значајан допринос области органске и биоорганске хемије. Акцент се ставља на методологију органских синтеза, органску катализу, на испитивање биолошке активности синтетисаних једињења, а у циљу њихове потенцијалне примене. Оригиналност и актуелност резултата који су проистекли из радова потврђена је објављивањем двадесет осам научних радова до сада, а од избора у звање научни сарадник тринаест (међу њима је преко 70% радова публикованих у категоријама M21 и M22). На основу увида у научни опус кандидата комисија је закључила да су научни радови др Душице Симијонових из области хемије и резултат су оригиналног научног рада.

##### *Показатељи успеха у научном раду:*

##### *Рецензије научних радова*

Др Душица Симијонових је, по позиву едитора, рецензирала научне радове за следеће часописе са SCI листе (докази дати у Прилогу):

*RSC Advances* (M22, IF = 3,049): 1 рецензија

*Bioorganic Chemistry* (M21, IF = 3,926): 1 рецензија  
*Letters in Organic Chemistry* (M23, IF = 0,723): 2 рецензије

*Чланства у научним друштвима*

Др Душица Симијонових је члан Српског хемијског друштва. (Доказ дат у Прилогу).

***Ангажованост у развоју услова за научни рад, образовању и формирању научних кадрова:***

*Допринос развоју науке у земљи*

Др Душица Симијонових је ангажована као истраживач на научним пројектима Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије од 2008. године. Остварила је успешну сарадњу са многим домаћим и иностраним научним институцијама, о чему сведоче публиковани радови, углавном мултидисциплинарног карактера, који доприносе домаћим научним пројектима и развоју науке у земљи уопште. До сада је објавила двадесет осам научних радова (осам радова из категорије М21, четрнаест радова из категорије М22 и шест радова из категорије М23) и деветнаест саопштења на научним конференцијама (два из категорије М33, тринаест из категорије М34 и четири из категорије М64).

*Менторство при изради мастер, магистарских и докторских радова, руковођење специјалистичким радовима*

Др Душица Симијонових је активно и непосредно учествовала у изради дипломских, завршних и мастер радова, и била члан комисија за њихову одбрану (докази дати у Прилогу).

*Педагошки рад*

У Институту за хемију ПМФ-а у Крагујевцу др Душица Симијонових је успешно изводила експерименталне вежбе за студенте хемије из предмета Биоорганска хемија на мастер студијама хемије. Поред тога, у претходном периоду учествовала је и у извођењу вежби из предмета Органска хемија 2 и Органски индустријски загађивачи на основним студијама хемије.

*Сарадња са научним институцијама*

Др Душица Симијонових остварила је успешну сарадњу са професором Константинос Литинасом са Депармана за органску хемију Аристотеловог Универзитета у Солуну (Aristotle University of Thessaloniki, Department of Chemistry), где је провела укупно 6 месеци и што је, за сада, резултирало публикацијом једног научног рада из категорије М21 и саопштења. Потврда о боравку је дата у Прилогу. Такође, др Душица Симијонових

сарађује и са бројним домаћим институцијама, као што су: Истраживачко-развојни центар за биоинжењеринг – БиоИРЦ, у Крагујевцу, Институт за нуклеарне науке „Винча“, Хемијски факултет Универзитета у Београду и Департман за хемијско-технолошке науке Државног универзитета у Новом Пазару. Резултат сарадње су бројни радови из библиографије кандидата који су значајно допринели домаћим научним пројектима Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије (пројекти бр. 174028, 172014 и 172016).

### ***Квалитет научних резултата:***

#### *Утицајност*

Према бази података (*Scopus*) укупан број цитата објављених радова др Душице Симијоновић износи 212, а без аутоцитата 123. Хетероцитатни Хиршов (*h*) индекс износи 6. Сви цитати су у позитивном смислу. Најцитиранији радови су M21/1, M21/2, M21/4, M21/5\* и M22/4. Радови M21/2 и M21/5\* су цитирани у неким од најпрестижнијих часописа у својој области:

M21/2 – *Journal of Catalysis*, M21, IF = 7,723, 25/148; *Applied Organometallic Chemistry*, M21, IF = 3,581, 14/72; *Chemical Society Reviews*, M21a, IF = 28,760, 2/154.

M21/5\* – *European Journal of Organic Chemistry*, M21, IF = 3,029, 16/57; *Antioxidants*, M21a, IF = 4,52, 6/61.

Листа радова са бројем цитата дата је у Прилогу.

#### *Параметри квалитета часописа*

У досадашњем научно-истраживачком раду др Душица Симијоновић је остварила запажене резултате не само по броју публикованих радова већ и по њиховом квалитету. Од укупно двадесет осам научних радова, кандидат је након избора у звање научни сарадник објавила тринаест научних радова, од којих четири рада из категорије M21 (*RSC Adv.*, IF = 3,840, 33/157; *RSC Adv.*, IF = 3,840, 33/157; *Roy. Soc. Open. Sci.*, IF = 2,504, 17/64; *Bioorg. Chem.*, IF = 3,929, 12/57), шест радова из категорије M22 (*J. Mol. Model.*, IF = 1,867, 61/148; *Chem. Pap.*, IF = 1,468, 79/154; *Mol. Phys.*, IF = 1,870, 87/146; *Chem. Pap.*, IF = 1,326, 97/163; *RSC Adv.*, IF = 3,108, 59/166; *J. Mol. Struct.*, IF = 2,011, 86/147), и три рада из категорије M23 (*J. Mol. Struct.*, IF = 1,780, 94/144; *ChemistrySelect.*, IF = 1,505, 105/171; *Chem. Pap.*, IF = 1,258, 110/166).

Збир импакт фактора за све објављене радове је 63,382, а од избора у звање научни сарадник 30,306.

#### *Ефективни број радова и број радова нормиран на основу броја коаутора*

Након избора у звање научни сарадник др Душица Симијоновић има 13 научних резултата. На само једном научном раду, M21/8\*, је више од седам аутора, па је након

нормирања према формули  $K/(1+0,2(n-7))$ ,  $n > 7$  укупан М фактор мањи за 1,33. Остали научни резултати не подлежу нормирању. Нормирани рад др Душице Симијоновић је мултидисциплинарни рад, а према Правилнику о начину вредновања: „За поједине области са експерименталним интердисциплинарним истраживањем (у којима учествују истраживачи из различитих области) формула  $K/(1+0,2(n-7))$ ,  $n > 7$  може бити замењена са формулом  $K/(1+0,2(n-10))$ ,  $n > 10$ , посебном одлуком Министарства на основу образложеног предлога одговарајућег матичног научног одбора. (Важи за часописе М21 и М22.)“ Како ова процедура захтева време, нормирање је у овом извештају урађено према првој формули, чиме кандидат није оштећен, јер и у том случају др Душица Симијоновић испуњава квантитативне захтеве за стицање научног звања *виши научни сарадник*.

*Степен самосталности и степен учешћа у реализацији радова у научним центрима у земљи и иностранству; Допринос кандидата реализацији коауторских радова*

Кандидат др Душица Симијоновић је показала висок степен самосталности у реализацији истраживања, при чему је први аутор и аутор за кореспонденцију на три рада из категорије М20. Њен допринос у реализацији коауторских радова огледа се у извођењу експеримената, осмишљавању и развијању експерименталних техника, у анализи и тумачењу резултата добијених коришћењем различитих спектроскопских метода, у одређивању правца биолошких истраживања и метода које ће бити коришћене, као и интерпретацији добијених резултата. Учествује у писању радова на којима је коаутор, а такође и у одабору одговарајућег научног часописа.

Све наведено указује на висок степен самосталности као научног радника, способности тумачења и организације различитих стручних и научно-истраживачких задатака из различитих области науке, одговорности и професионалности, као и способности за предвођење, али и тимски рад у мултидисциплинарним истраживањима.

### *Значај радова*

Др Душица Симијоновић је у својим радовима дала оригиналан научни допринос у области органске и биоорганске хемије. Главни део њених истраживања чине „зелене синтезе“ потенцијално биолошки активних органских и метал-органских једињења. Синтетисана једињења припадају групи фенолних Schiff-вих и Mannich-ових база, деривата дикумарола, као и групи азотних хетероцикличних молекула који у својој структури садрже пиперидинску, пиразолску или пиразоло-фталазинску јединицу, а често и фенолни део. За синтезе су као катализатори коришћене неке етаноламинске јонске течности, гликолна киселина и природан лако доступан катализатор – лимунов сок. Такође, остварене су и синтезе неких метал-органских комплекса са Schiff-вим базама као лигандима. За структурну карактеризацију овако добијених једињења коришћене су различите експерименталне и теоријске технике. Постигнути резултати у оквиру ових истраживања дају значајан допринос методологији „зелене органске синтезе“, у смислу

проналажења нових, унапређених и еколошки прихватљивих синтетичких приступа ка новим биоактивним молекулима. Добијени производи су даље тестирани у циљу одређивања њихове антиоксидативне и антиинфламаторне активности. Израчунавањем одговарајућих термодинамичких и кинетичких параметара одређени су највероватнији механизми антиоксидативне активности испитиваних једињења. Такође, остварен је и детаљан увид у механизме антиинфламаторне активности применом молекулског моделовања и молекулске динамике. Нека добијена једињења тестирана су ради одређивања њиховог цитотоксичног и прооксидативног ефекта према различитим врстама хуманих ћелијских линија канцера и према здравим, непромењеним ћелијама. Добијени резултати су показали да нека од испитиваних једињења испољавају значајан цитотоксични ефекат.

Научни резултати др Душице Симијонових и њена компетентност за избор у звање *виши научни сарадник* се могу квантитативно окарактерисати следећим вредностима М фактора:

Ознака резултата	Укупан број радова	Вредност резултата	Укупна вредност (нормирано)
M21	8	8	64 (62,67)
M22	14	5	70
M23	6	3	18
M33	2	1	2
M34	13	0,5	6,5
M64	4	0,2	0,8
M71	1	6	6
<b>Укупно</b>			<b>167,3 (165,97)</b>

Од тога након избора у звање научни сарадник:

Ознака резултата	Број радова након избора у звање	Вредност резултата	Укупна вредност (нормирано)
M21	4	8	32 (30,67)
M22	6	5	30
M23	3	3	9
M33	2	1	2
M34	3	0,5	1,5
M64	3	0,2	0,6
<b>Укупно</b>			<b>75,1 (73,77)</b>

На основу свега изложеног може се донети следећи:

#### V Закључак и предлог комисије

На основу анализе приложене документације и разматрања постигнутих резултата, комисија закључује да се кандидаткиња др Душица Симијонових успешно бави научно-истраживачким радом и да је постигла запажене резултате у области органске и

биоорганиске хемије. Успешно влада методологијом истраживања и модерним истраживачким техникама, што је чини компетентном да учествује у решавању многобројних проблема савремене хемије.

Централни део њених истраживања чине синтезе потенцијално биолошки активних органских једињења, које се најчешће реализују применом алата „зелене хемије“. Синтетисана једињења припадају групи фенолних Schiff-вих и Mannich-ових база, деривата дикумарола, као и групи азотних хетероцикличних молекула који у својој структури садрже и фенолну јединицу. Такође, остварене су и синтезе неких метал-органских комплекса са одређеним бројем једињења. Добијена једињења су касније подвргнута испитивању њихове антиоксидативне, а у неким случајевима и антиинфламаторне, односно антитуморске активности. За структурну карактеризацију овако добијених једињења коришћене су различите експерименталне и теоријске технике.. Резултати постигнути у оквиру ових истраживања дају значајан допринос области органске и биоорганиске хемије, са аспекта катализе и методологије органских синтеза, али и медицинској хемији, испитивањем биолошке активности синтетисаних једињења у циљу њихове потенцијалне примене.

Значај постигнутих резултата кандидата др Душице Симијоновић потврђује већи број објављених научних резултата. До сада је објавила укупно двадесет осам научних радова, од којих осам радова из категорије M21, четрнаест радова из категорије M22, шест радова из категорије M23, као и деветнаест саопштења на научним конференцијама (два из категорије M33, тринаест из категорије M34 и четири из категорије M64). Укупно има **167,3** (нормирано на број аутора **165,97**) поена.

Након избора у звање научни сарадник објавила је тринаест научних радова, од којих су четири рада из категорије M21, шест радова из категорије M22 и три рада из категорије M23, као и осам саопштења са међународних и домаћих скупова. Од претходног избора у научно звање до сада, остварила је **75,1** поена (нормирано на број аутора **73,77** поена).

Збир импакт фактора за све објављене радове је 63,382, а од избора у звање научни сарадник 30,306. Према базама података, укупан број хетероцитата (искључујући аутоцитате свих аутора) објављених радова износи 123, а Хиршов (*h*) индекс износи 6. Сви цитати су у позитивном смислу.

Др Душица Симијоновић је радила више рецензија научних радова за часописе са SCI листе: *RSC Advances*, *Bioorganic Chemistry* и *Letters in Organic Chemistry*.

Др Душица Симијоновић остварила је сарадњу са иностраним и великим бројем домаћих институција. Резултат сарадње су бројни научни радови из библиографије кандидата, који су значајно допринели домаћем научном пројекту Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије, бр. 172016.

На основу увида у научно-истраживачки рад и целокупне досадашње активности, мишљења смо да је др Душица Симијоновић остварила висок ниво квалитета у свом досадашњем раду.

## МИНИМАЛНИ КВАНТИТАТИВНИ ЗАХТЕВИ ЗА СТИЦАЊЕ НАУЧНОГ ЗВАЊА ВИШИ НАУЧНИ САРАДНИК

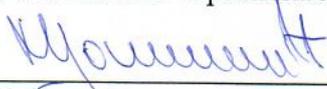
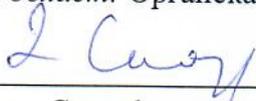
За природно-математичке и медицинске науке

Диференцијални услов од првог избора у звање <i>научни сарадник</i> до избора у звање <i>виши научни сарадник</i>	Неопходно	Остварено (нормирано)
Укупно	50	75,1 (73,77)
M10+M20+M31+M32+M33+M41+M42+M90 (Обавезни 1)	40	73 (71,67)
M11+M12+M21+M22+M23 (Обавезни 2)	30	71 (69,67)

Комисија сматра да др Душица Симијоновић у потпуности испуњава све законом предвиђене услове за избор у научно звање *виши научни сарадник* и стога, са задовољством, предлаже Наставно-научном већу Природно-математичког факултета у Крагујевцу да прихвати предлог за њен избор у научно звање *виши научни сарадник* и упуту га надлежној комисији Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије у даљу процедуру.

У Крагујевцу и Београду,  
2. 12. 2019. године

### КОМИСИЈА

-   
Др Зорица Петровић, редовни професор  
(председник комисије)  
Природно-математички факултет у Крагујевцу  
Научна област: Органска хемија
-   
Др Милан Јоксовић, редовни професор  
Природно-математички факултет у Крагујевцу  
Научна област: Органска хемија
-   
Др Душан Сладић, редовни професор  
Хемијски факултет у Београду  
Научна област: Органска хемија