

## **НАУЧНОМ ВЕЋУ ИНСТИТУТА ЗА НУКЛЕАРНЕ НАУКЕ “ВИНЧА”- ИНСТИТУТА ОД НАЦИОНАЛНОГ ЗНАЧАЈА ЗА РЕПУБЛИКУ СРБИЈУ - УНИВЕРЗИТЕТА У БЕОГРАДУ**

На 11. редовној седници Научног већа Института за нуклеарне науке “Винча” - Института од националног значаја за Републику Србију Универзитета у Београду, одржаној 28.09.2023. године именована је комисија у следећем саставу:

1. Др Јован Недељковић, научни саветник, Институт за нуклеарне науке „Винча“ Института од националног значаја за Републику Србију, Универзитет у Београду,
2. Др Весна Лазић, научни саветника Института за нуклеарне науке „Винча“, Институт од националног значаја за Републику Србију
3. Др Тамара Тодоровић, редовни професор, Универзитет у Београду – Хемијски факултет

са задатком да анализира и оцени научно-истраживачки рад **др Душана Средојевића, вишег научног сарадника**, Института за нуклеарне науке „Винча“, Института од националног значаја за Републику Србију, Универзитета у Београду, и утврди испуњеност услова за његов избор у звање **НАУЧНИ САВЕТНИК**.

На основу прегледа приложених материјала, као и личног увида у досадашњи истраживачки рад кандидата, а у складу са Законом о науци и истраживањима (Сл. гласник РС, бр. 49/19), и Правилником о стицању истраживачких и научних звања (Сл. гласник РС, број 159/2020, 14/2023-51), Комисија подноси следећи

## **ИЗВЕШТАЈ**

### **1. БИОГРАФСКИ ПОДАЦИ КАНДИДАТА И ПРОФЕСИОНАЛНА КАРИЈЕРА**

Др Душан Средојевић је рођен 24. децембра 1979. године у Крушевцу. Основну школу је завршио у Јасици, а средњу (гимназију) у Крушевцу. На Хемијски факултет, Универзитета у Београду, се уписао школске 1998/99 године, а дипломирао је октобра 2004. године. У новембру 2004. године Душан Средојевић уписује магистарске студије на Хемијском факултету, Универзитета у Београду, при Катедри за неорганску хемију. Магистарску тезу, из области теоријске хемије, под називом: „*Стекинг интеракције између хелатних и фенил прстенова у квадратно-планарним комплексима прелазних метала*“ је одбранио на Хемијском факултету, марта 2009. године. Непосредно по одбрани магистарске тезе Душан Средојевић се уписује на докторске студије на Хемијском факултету, такође при Катедри за неорганску хемију. Докторску дисертацију под називом: „*Проучавање стекинг интеракција хелатних прстенова у квадратно-планарним комплексима прелазних метала*“ је одбранио јула 2012. године (**Прилог: Диплома/уверење о докторату**). Магистарска и докторска дисертација су урађене под руководством Проф. др Снежане Зарић.

У периоду 2005-2009 је радио као истраживач-приправник на Хемијском факултету, а у периоду 2009-2013 као истраживач сарадник у Иновационом Центру Хемијског факултета, Универзитета у Београду. Изабран је у звање научног сарадника 17. јула 2013. године. Од марта 2013. године до септембра 2016. године Душан Средојевић је био на постдокторским студијама на Тексас А&М Универзитету у Катару, где је радио под руководством Проф. др Edward N. Brothers-а. По повратку са постдокторских студија у Катару (2016), запошљава се као научни сарадник у Институту за нуклеарне науке “Винча”. Звање виши научни сарадник стекао је 22.04.2019. године (**Прилог: Одлука о стицању претходног научног звања**). У периоду 2018-2019 поново ради на Тексас А&М Универзитету у Катару, на другој теми, овога пута под руководством Проф. др Миливоја Белића. Трећи пут одлази на Тексас А&М Универзитет у Катару у јуну 2021. године и до јануара 2022. године ради под руководством Проф. др Миливоја Белића, а од јануара до септембра 2022. године, на другој теми, под руководством Проф. др Edward N. Brothers-а.

Био је ангажован на реализацији више пројеката Министарства просвете, науке и технолошког развоја:

- Пројекат интегрално-интердисциплинарних истраживања **45020**: „Материјали редуковане димензионалности за ефикасну апсорпцију светлости и конверзију енергије”, 2011-2023 (Руководилац: Др Јован Недељковић),
- Пројекат основних истраживања **172065**: “Нековалентне интеракције  $\pi$ -система и њихова улога у молекулском препознавању“, 2011-2023, (Руководилац: Проф. др Снежана Зарић),
- МНТР – Пројекат основних истраживања **142037**: „Проучавање односа реактивности, нековалентних интеракција и структура молекула и моделовање хемијских система“, 2006-2010 (Руководилац: Проф. др Снежана Зарић),
- МНЗЖС – Пројекат основних истраживања **1795**: „Расветљавање биолошке активности, механизма реакција и нековалентних интеракција засновано на проучавању структуре молекула“, 2002-2005 (Руководилац: Проф. др Снежана Зарић)

Учествовао је на следећим међународним пројектима:

- Пројекат билатералне сарадње између Србије и Француске **MNTR-CNRS 20510** (Centre National de la Recherche Scientifique), Универзитета у Стразбуру - Laboratoire de Synthèses Métallo-Induites (2007-2008),
- Пројекат билатералне сарадње између Србије и Немачке (Хемијски факултет- Max-Planck Institute у Дрездену) **MNTR-DAAD** (2009-2010),
- Пројекат билатералне сарадње између Србије и Француске **MNTR-CNRS** (Centre National de la Recherche Scientifique), Универзитета у Стразбуру - Laboratoire de Synthèses Métallo-Induites (2010-2011),
- Пројекат билатералне сарадње између Србије и Немачке (Хемијски факултет - Max-Planck Institute у Дрездену) **MNTR-DAAD** (2011-2012),

- Пројекат финансиран од Швајцарске националне научне фондације "Supramolecular training for students and young researchers in the Balkan area" (2012-2014).
- Истраживачки пројекат од националног приоритета (Катар) (NPRP: 5 - 318 - 1 - 063) "Theoretical investigation of olefin purification via bidentate metal complexes" (2013-2015),
- Интерни пројекат Тексас A&M Универзитета у Катару (Seed Funds No.: 482162-60160) „Theoretical investigation of olefin purification via  $\pi$ -conjugated materials containing metals" (2015-2016),
- Истраживачки пројекат од националног приоритета (Катар) (NPRP: 7-665-1-125) „Intercalated graphene: effects of substrates on functionalities" (2015-2018), (Прилог: Остала документа од значаја).
- Истраживачки пројекат од националног приоритета (Катар) (NPRP11S-1126-170033) „Self-organized optical structures in semiconductor heterojunctions, nanocomposites, metamaterials, photovoltaics, and plasmonics, for applications in energy and information technologies" (2019-2021), (Прилог: Остала документа од значаја).
- Истраживачки пројекат од националног приоритета (Катар) (NPRP11S-0116-180320) „Graphene Carbocatalysts for the Electrocatalytic Reduction of CO<sub>2</sub> to Fuels" (2019-2021), (Прилог: Остала документа од значаја).

❖ Руководилац је једног међународног пројекта:

**Пројекат мултилатералне научне и технолошке сарадње у дунавском региону (337-00-140/2023-05/08):** „Мултифункционални хибридни материјали на бази ZnO за санацију отпадних вода“, (2023-2025). (Прилог: Руковођење НИ пројектима или менторство).

❖ Руководилац је једног пројектног задатка:

„Теоријско (ДФТ) моделовање различитих хибридних система на бази интерфацијалних комплекса са преносом наелектрисања“ на пројекту интегрално-интердисциплинарних истраживања **45020:** „Материјали редуковане димензионалности за ефикасну апсорпцију светлости и конверзију енергије" (2011-2023). (Прилог: Руковођење потпројектима и пројектним задацима).

❖ Институтски Ментор на изради докторске дисертације студенткиње Миљане Дукић, истраживача приправника Института за нуклеарне науке „Винча“, Института од националног значаја за Републику Србију, студента докторских студија, Универзитета у Београду (Прилог: Руковођење НИ пројектима или менторство).

❖ Кандидат је био члан комисије за избор у звање научни сарадник др Слађане Доронтић (Прилог: Остала документа од значаја).

До 2010. године је био сврстан у **A1** категорију истраживача, а од 2010. године до данас је сврстан у **A2** категорију истраживача по критеријуму Министарства за просвету, науку и технолошки развој.

Дугогодишњи је рецензент у часописима: *The Journal of Physics and Chemistry of Solids* (ИФ = 3.995), *Materials Science in Semiconductor Processing* (ИФ = 4.644), *Materials Chemistry and Physics* (ИФ = 4.60), *Journal of Material Chemistry C* (ИФ = 8.067), *The Journal of Physical Chemistry C* (ИФ = 3.70), *International Journal of Energy Research* (ИФ = 5.164), *New Journal of Chemistry* (ИФ = 3.30), *ACS omega* (ИФ = 4.10), *Chemical Physics Letters* (ИФ = 2.719), *Computational Biology and Chemistry* (ИФ = 3.737), *Applied Surface Science* (ИФ = 6.70). (Прилог: Остала документа од значаја).

У досадашњем раду објавио је 47 радова у међународним часописима који су цитирани 931 пут (1035 пута са аутоцитатима) и са h индексом 18 (извор SCOPUS). (Прилог: Остала документа од значаја).

### Центар изузетних вредности

Ангажован је у научно-истраживачкој делатности центра изузетних вредности под називом „Центар за конверзију светлосне енергије - ЦОНВЕРСЕ”, основаног 2021. у оквиру Лабораторије за радијациону хемију и физику, Института за нуклеарне науке „Винча”, Института од националног значаја за Републику Србију под руководством проф. др Мирослава Драмићанина. Центар за конверзију светлосне енергије - ЦОНВЕРСЕ је акредитован од стране Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије. Др Душан Средојевић је део научног тима Лабораторије за примене материјала у оквиру Центра (<https://converse-civ.org>, Прилог: Остала документа од значаја).

## 2. БИБЛИОГРАФИЈА

**Табела 1.** Списак радова и саопштења др Душана Средојевића објављених **НАКОН** покретања процедуре за избор у звање **ВИШИ НАУЧНИ САРАДНИК** са којима конкурише у звање **НАУЧНИ САВЕТНИК**

### M21a

	Резултат	Импакт фактор (ранг часописа) година	Нормирани бодови	Број хетероцитата	SNIP
1	I. Vukoje, V. Lazić, <b>D. Sredojević</b> , M. M. Fernandes, S. Lanceros-Mendez, S. P. Ahrenkiel, J. M. Nedeljković, <b>Influence of glucose, sucrose, and dextran coatings on the stability and toxicity of silver nanoparticles</b>	<b>8.200</b> (7/72)	<b>10.00</b>	<b>5</b>	<b>1.518</b>

	<i>International Journal of Biological Macromolecules</i> 2022, 194, 461–469.				
2	M. Barló, X. Zhang, I. Kulai, Da S. Yang, <b>D. N. Sredojević</b> , A. Sil, X. Ji, K. Salih, H. S. Bazzi, H. Bronstein, L. Fang, J. Kim, T. Marks, X. Guo, M. Al-Hashimi, <b>Indacenodithiazole Ladder Type Bridged Di(thiophene)-Difluoro-Benzothiadiazole Conjugated Copolymers as Ambipolar Organic Field Effect Transistors</b> <i>Chemistry of Materials</i> 2019, 31, 9488-9496.	<b>9.567</b> (29/314)	<b>3.846</b>	<b>21</b>	<b>1.559</b>
3	D. Dekanski, B. Spremo-Potparević, V. Bajić, L. Živković, D. Topalović, <b>D. N. Sredojević</b> , V. Lazić, J. M. Nedeljković, <b>Acute toxicity study in mice of orally administrated TiO<sub>2</sub> nanoparticles functionalized with caffeic acid</b> <i>Food and Chemical Toxicology</i> 2018, 115, 42-48.	<b>3.977</b> (10/133) 2017	<b>8.333</b>	<b>18</b>	<b>1.364</b>
4	M. G. Miljković, V. Lazić, K. Banjanac, S. Z. Davidović, D. I. Bezbradica, A. D. Marinković, <b>D. Sredojević</b> , J. M. Nedeljković, S. I. Dimitrijević Branković, <b>Immobilization of dextransucrase on functionalized TiO<sub>2</sub> supports.</b> <i>International Journal of Biological Macromolecules</i> 2018, 114, 1216–1223.	<b>4.784</b> (8/87)	<b>7.143</b>	<b>18</b>	<b>1.518</b>

## M21

	Резултат	Импакт фактор (ранг часописа) година	Норми- рани бодови	Број хетеро- цитата	SNIP
1	M. Malček, <b>D. Sredojević</b> , O. Tkáč, L. Bucinsky, <b>Effect of Surface Curvature on the Hydrogen Storage Capacity of the Sc-, Ti-, and V-Doped Graphene Surfaces: Theoretical Study</b> <i>Diamond &amp; Related Materials</i> , 2023, 139, 110335 (14p)	<b>4.100</b> (6/21) 2022	<b>8.000</b>	<b>0</b>	<b>0.995</b>
2	M. Shahriari-Khalaji, F. Zabihi, A. Bahi, <b>D. Sredojević</b> , J. M. Nedeljković, D. K. Macharia, M. Ciprian, S. Yang, F. Kob, <b>Photon-driven bactericidal performance of surface-modified TiO<sub>2</sub> nanofibers</b> <i>J. Mater. Chem. C</i> , 2023, 11, 5796–5805.	<b>6.400</b> (85/342)	<b>5.714</b>	<b>2</b>	<b>1.229</b>
3	A. Zarubica, <b>D. Sredojević</b> , R. Ljupković, M. Randelović, N. Murafa, M. Stoiljković, V. Lazić, J. M. Nedeljković, <b>Photocatalytic ability of visible-light-responsive hybrid ZrO<sub>2</sub> particles</b> <i>Sustainable Energy Fuels</i> 2023, 7, 2279–2287.	<b>6.813</b> (91/345) 2021	<b>6.666</b>	<b>0</b>	<b>0.938</b>

4	Z. Feng, M. Comi, Y. Ren, <b>D. Sredojević</b> , S. Attar, J. Yang, Z. Wang, R.-S. Chen, S.-T. Han, M. Al-Hashimi, Y. Zhou, <b>Organic memory devices and synaptic simulation based on indacenodithienothiophene (IDTT) copolymers with improved planarity.</b> <i>J. Mater. Chem. C</i> 2022, 10, 16604–16613.	<b>6.400</b> (85/342)	<b>4.444</b>	<b>0</b>	<b>1.229</b>
5	M. Barlóg, S. K. Podiyanachari, S. Attar, <b>D. N. Sredojević</b> , H. S. Bazzi, M. Al-Hashimi, <b>Molecular strategy towards ROMP-derived hyperbranched poly(olefin)s featuring various <math>\pi</math>-bridged perylene diimides</b> <i>Polymer Chemistry</i> 2022, 13, 5912-5922.	<b>4.600</b> (18/86)	<b>8.000</b>	<b>0</b>	<b>0.888</b>
6	<b>D. Sredojević</b> , V. Lazić, A. Pirković, J. Periša, N. Murafa, B. Spremo-Potparević, L. Živković, D. Topalović, A. Zarubica, M. Jovanović Krivokuća, J. M. Nedeljković, <b>Toxicity of Silver Nanoparticles Supported by Surface-Modified Zirconium Dioxide with Dihydroquercetin</b> <i>Nanomaterials</i> 2022, 12, 3195.	<b>5.300</b> (38/159)	<b>4.444</b>	<b>0</b>	<b>1.065</b>
7	<b>D. Sredojević</b> , S. Stavrić, V. Lazić, S. P. Ahrenkiel, J. M. Nedeljković, <b>Interfacial charge transfer complex formation between silver nanoparticles and aromatic amino acids</b> <i>Phys. Chem. Chem. Phys.</i> 2022, 24, 16493-16500.	<b>3.300</b> (9/35)	<b>8.000</b>	<b>1</b>	<b>0.906</b>
8	Z. Barbierikova, M. Šimunkova, V. Brezova, <b>D. Sredojević</b> , V. Lazić, D. Loncarević, J. M. Nedeljković, <b>Interfacial charge transfer complex between TiO<sub>2</sub> and non-aromatic ligand squaric acid</b> <i>Optical Materials</i> , 2022, 123, 111918.	<b>3.900</b> (28/100)	<b>8.000</b>	<b>1</b>	<b>0.924</b>
9	V. Lazić, A. Pirković, <b>D. Sredojević</b> , J. Marković, J. Papan, S. Phillip Ahrenkiel, I. Janković-Castvan, D. Dekanski, M. Jovanović-Krivokuća, J. M. Nedeljković, <b>Surface-modified ZrO<sub>2</sub> nanoparticles with caffeic acid: Characterization and in vitro evaluation of biosafety for placental cells</b> <i>Chemico-Biological Interactions</i> , 2021, 347, 109618.	<b>5.194</b> (83/296) 2020	<b>5.000</b>	<b>5</b>	<b>1.057</b>
10	V. Lazić, Lj. S. Živković, <b>D. Sredojević</b> , M. M. Fernandes, S. Lanceros-Méndez, S. Phillip Ahrenkiel, J. M. Nedeljković, <b>Tuning properties of cerium dioxide nanoparticles by surface modification with catecholate-type of ligands</b> <i>Langmuir</i> , 2020, 36(33), 9738–9746.	<b>3.683</b> (76/293) 2018	<b>8.000</b>	<b>3</b>	<b>0.927</b>
11	<b>D. N. Sredojević</b> , M. R. Belić, Z. Šljivančanin, <b>Hydrogen Evolution Reaction Over Single-Atom Catalysts Based on Metal Adatoms at Defected Graphene and <i>h</i>-BN.</b>	<b>4.189</b> (90/314) 2019	<b>8.000</b>	<b>19</b>	<b>0.853</b>

	<i>J. Phys. Chem. C.</i> 2020, 124(31), 16860-16867.				
12	D. Božanić, G. Garcia, L. Nahon, <b>D. N. Sredojević</b> , V. Lazić, I. Vukoje, P. S. Ahrenkiel, V. Đoković, Z. Šljivančanin, J. Nedeljković, <b>Interfacial Charge-Transfer Transitions in Colloidal TiO<sub>2</sub> Nanoparticles Functionalized with Salicylic Acid and 5-Aminosalicylic Acid: A Comparative Photoelectron Spectroscopy and DFT Study</b> <i>J. Phys. Chem. C.</i> 2019, 123, 29057-29066.	4.189 (90/314)	5.000	9	0.853
13	<b>D. N. Sredojević</b> , S. Moncho, R. K. Raju, M. R. Belić, E. N. Brothers, <b>Reversible Olefin Addition to Extended Lattices of a Nickel/Selenium Framework</b> <i>J. Phys. Chem. C.</i> 2018, 122(39), 22424–22434.	4.309 (44/148)	8.000	1	0.853
14	V. Đorđević, <b>D. N. Sredojević</b> , J. Dostanić, D. Lončarević, S. P. Ahrenkiel, N. Švračić, E. N. Brothers, M. Belić, J. M. Nedeljković, <b>Visible light absorption of surface modified Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> powders: A comparative DFT and experimental study</b> <i>Microporous and Mesoporous Materials</i> 2019, 273, 41-49.	4.551 (84/314)	5.714	11	1.026

## M22

	Резултат	Импакт фактор (ранг часописа) година	Норми- рани бодови	Број хетеро- цитата	SNIP
1	<b>D. N. Sredojević</b> , M. R. Belić, Ž. Šljivančanin, <b>Single-Atom Catalysts Supported by Graphene and Hexagonal Boron Nitride: Structural Stability in the Oxygen Environment</b> <i>J. Phys. Chem. C.</i> 2022, 12, 8637–8644.	3.700 (76/161)	5.000	0	0.853
2	M. Prekajski-Đorđević, I. Vukoje, V. Lazić, V. Đorđević, <b>D. N. Sredojević</b> , J. Dostanić, D. Lončarević, S. P. Ahrenkiel, M. R. Belić, J. M. Nedeljković, <b>Electronic structure of surface complexes between CeO<sub>2</sub> and benzene derivatives: A comparative experimental and DFT study</b> <i>Materials Chemistry and Physics</i> 2019, 236, 121816	3.408 (115/314)	3.125	2	1.039
3	Z. Barbieriková, D. Dvoranová, V. Brezová, E. Džunuzović, <b>D. N. Sredojević</b> , V. Lazić, J. M. Nedeljković, <b>Visible-light-responsive surface-modified TiO<sub>2</sub> powder with 4-chlorophenol: A combined experimental and DFT study</b> <i>Optical Materials</i> 2019, 89, 237-242.	2.779 (148/314)	5.000	14	0.924

## M23

	Резултат	Импакт фактор (ранг часописа) година	Норми- рани бодови	Број хетеро- читага	SNIP
1	<b>D. N. Sredojević</b> , R. K. Raju, S. Moncho, M. R. Belić, E. N. Brothers, <b>Computational investigation of cobalt and copper bis(oxathiolene) complexes as an alternative for olefin purification</b> <i>Journal of Molecular Modeling</i> 2020, 26(8), 1-14.	<b>1.810</b> (85/112)	<b>3.000</b>	<b>0</b>	<b>0.580</b>
2	V. Lazić, I. Vukoje, B. Milićević, B. Spremo-Potparević, L. Živković, D. Topalović, V. Bajić, <b>D. Sredojević</b> , J. Nedeljković, <b>Efficiency of interfacial charge transfer complex between TiO<sub>2</sub> nanoparticles and caffeic acid against DNA damage in vitro: combinatorial analysis</b> <i>Journal of the Serbian Chemical Society</i> 2019, 84 (6) 539-553.	<b>1.097</b> (138/177)	<b>2.143</b>	<b>2</b>	<b>0.383</b>
3	T. S. Kovač, E. S. Džunuzović, J. V. Džunuzović, B. Milićević, <b>D. N. Sredojević</b> , E. N. Brothers, J. M. Nedeljković, <b>Visible light absorption of surface modified TiO<sub>2</sub> nanoparticles with vitamin B<sub>6</sub>: a comparative experimental and DFT study</b> <i>Journal of the Serbian Chemical Society</i> 2018, 83 (7-8), 899-909.	<b>0.828</b> (140/172)	<b>3.000</b>	<b>0</b>	<b>0.383</b>
4	<b>D. N. Sredojević</b> , Ž. Šljivančanin, E. N. Brothers, M. Belić, <b>Formic acid synthesis by CO<sub>2</sub> hydrogenation over single-atom catalysts based on Ru and Cu embedded in graphene.</b> <i>ChemistrySelect</i> 2018, 3, 2631-2637.	<b>1.716</b> (107/172)	<b>3.000</b>	<b>22</b>	<b>0.495</b>

## M32

	Резултат	Норми- рани бодови
1	<b>Dušan N. Sredojević</b> , Milivoj R. Belić, Edward N. Brothers, Željko Šljivančanin, <b>Hydrogen evolution catalyzed by metal-decorated defected graphene and hexagonal boron-nitride.</b> ASC Research Conference: Chemistry and Chemical Engineering in MENA, 2022, Doha, Qatar, 9-11 May 2022. <a href="https://acsoncampus.acs.org/events/acs-research-conference-mena/">https://acsoncampus.acs.org/events/acs-research-conference-mena/</a>	<b>1.5</b>
2	<b>Dušan N. Sredojević</b> , Željko Šljivančanin, Edward N. Brothers, Milivoj R. Belić <b>Reduction of CO<sub>2</sub> into formic acid over the heterogeneous single-atom catalysts</b> EMN Rome Meeting 2019, Rome, Italy, 13-17 May 2019. <a href="http://emnmeeting.org/2019-roma/">http://emnmeeting.org/2019-roma/</a>	<b>1.5</b>



### M33

	Резултат	Норми- рани бодови
1	S. Dorontić, <b>D. Sredojević</b> , D. Bajuk Bogdanović, S. Jovanović <b>The mechanism behind Pd(II) and carbofuran-induced change of graphene quantum dots photoluminescence intensity</b> 28 <sup>th</sup> International Symposium on Analytical and Environmental Problems, November 14-15, 2022, Szeged, Hungary <a href="http://www2.sci.u-szeged.hu/isaep/">http://www2.sci.u-szeged.hu/isaep/</a>	1
2	S. S. Attar, J. H. Kim, <b>D. Sredojevic</b> , A. Kalin, S. Banerjee, L. Fang, M.-H. Yoon, M. Al-Hashimi <b>Thiazole-based conjugated ryleneimides co-polymers as unipolar semiconductors</b> Abstract of papers of the American Chemical Society, vol. 258. 1155 16 <sup>th</sup> ST, NW, WASHINGTON, DC 20036 USA: AMER CHEMICAL SOC, 2019.	1

**Табела 2.** Списак радова и саопштења др Душана Средојевића објављених ПРЕ покретања процедуре за избор у звање **ВИШИ НАУЧНИ САРАДНИК**

### M21a

	Резултат
1	R. K. Raju, <b>D. N. Sredojević</b> , S. Moncho, E. N. Brothers, <b>Nickel Bis(diselenolene) as a Catalyst for Olefin Purification,</b> <i>Inorganic Chemistry</i> 2016, 55 (20), pp. 10182–10191.
2	P. H. Woebkenberg, J. G. Labram, J-M. Swiecicki, K. Parkhomenko, <b>D. Sredojević</b> , J-P. Gisselbrecht, D. M. de Leeuw, Bradley, D. S. Donal, J-P. Djukic, T. D. Anthopoulos, <b>Ambipolar organic transistors and near-infrared phototransistors based on a solution-processable squarilium dye,</b> <i>Journal of Materials Chemistry</i> 2010, 20(18), pp. 3673-3680.
3	Z. D. Tomić, D. N. Sredojević and S. D. Zarić, <b>Stacking interactions between chelate and phenyl ring in square-planar transition metal complexes,</b> <i>Crystal Growth &amp; Design</i> 2006, 6, pp. 29-31.

### M21

	Резултат
1	V. Bajić, B. Spremo-Potparević, L. Živković, A. Čabarkapa, J. Kotur-Stevuljević, E. Isenović, <b>D. Sredojević</b> , I. Vukoje, V. Lazić, S. P. Ahrenkiel, <b>Surface-modified TiO<sub>2</sub> nanoparticles with ascorbic acid: antioxidant properties and efficiency against DNA damage in vitro,</b> <i>Colloids and Surfaces B: Biointerfaces</i> 2017, 155, pp. 323–331.
2	H.-L. Su, <b>D. N. Sredojević</b> , H. Bronstein, T. J. Marks, B. C. Schroeder, M. Al-Hashimi, <b>Bithiazole an Intriguing Electron Deficient Building for Plastic Electronic Applications,</b> <i>Macromolecular Rapid Comm.</i> 2017, 38, pp. 1600610.
3	D. Patra, J. Lee, J. Lee, <b>D. N. Sredojević</b> , A. J. P. White, H. S. Bazzi, E. N. Brothers, M. Heeney, L. Fang, M.-Han Yoon and M. Al-Hashimi, <b>Synthesis of low band gap polymers based on pyrrolo[3,2-d:4,5-d']bisthiazole (PBTz) and thienylenevinylene (TV) for organic thin-film transistors (OTFTs),</b> <i>J. Mater. Chem. C</i> 2017, 5, pp. 2247-2258.

4	P. Krokidas, M. Castier, S. E. Moncho, <b>D. N. Sredojević</b> , E. N. Brothers, H. T. Kwon, H-K. Jeong, J. S. Lee, I. Economou, <b>ZIF-67 Framework: A Promising New Candidate for Propylene/Propane Separations - Experimental Data and Molecular Simulations</b> , <i>J. Phys. Chem. C</i> 2016, 120(15), pp. 8116-8124.
5	D. P. Malenov, D. B. Ninković, <b>D. N. Sredojević</b> , S. D. Zarić, <b>Stacking of Benzene with Metal Chelates: Calculated CCSD(T)/CBS Interaction Energies and Potential-Energy Curves</b> , <i>ChemPhysChem</i> 2014, 15, pp. 2458-2461.
6	<b>D. N. Sredojević</b> , D. B. Ninković, G. V. Janjić, J. Zhou, M. B. Hall, S. D. Zarić, <b>Stacking Interactions of Ni(acac) Chelates with Benzene: Calculated Interaction Energies</b> , <i>ChemPhysChem</i> , 2013, 14(9), pp. 1797-1800.
7	W. Iali, F. L. Paglia, XF. Le Goff, <b>D. Sredojević</b> , M. Pfeffer, J-P. Djukic, <b>Room temperature tandem hydroamination and hydrosilation/protodesilation catalysis by a tricarbonylchromium-bound iridacycle</b> , <i>Chem. Comm.</i> 2012, 48(83), pp. 10310-2.
8	D. B. Ninković, G. V. Janjić, D. Ž. Veljković, <b>D. N. Sredojević</b> , S. D. Zarić, <b>What are the Preferred Horizontal Displacements in Parallel Aromatic-Aromatic Interactions? Significant Interactions at Large Displacements</b> , <i>ChemPhysChem</i> 2011, 12, pp. 3511-3514.
9	<b>D. N. Sredojević</b> , Z. D. Tomić, S. D. Zarić, <b>Evidence of Chelate-Chelate Stacking Interactions in Crystal Structures of Transition-Metal Complexes</b> , <i>Crystal Growth &amp; Design</i> , 2010, 10(9), pp. 3901-3908.
10	J-P. Djukić, C. Boulho, <b>D. Sredojević</b> , C. Scheeren, S. Zarić, L. Ricard and M. Pfeffer, <b>The Stereospecific Ligand Exchange at a pseudo-Benzylic T-4 Iridium Centre in Planar-Chiral Cycloiridated (hapto6-Arene)tricarbonylchromium complexes</b> , <i>Chemistry - A European Journal</i> , 2009, 5(41), pp. 10830-10842.
11	<b>D. N. Sredojević</b> , G. A. Bogdanović, Z. D. Tomić and S. D. Zarić, <b>Stacking vs. CH/<math>\pi</math> Interactions between Chelate and Aryl Rings in Crystal Structures of Square-Planar Transition Metal Complexes</b> , <i>CrystEngComm</i> ., 2007, 9, pp. 793-798.
12	M. K. Milčić, V. B. Medaković, <b>D. N. Sredojević</b> , N. O. Juranić and S. D. Zarić, <b>Electron delocalization mediated metal-dependent capacity for CH/<math>\pi</math> interactions of acetylacetonato chelates</b> , <i>Inorg. Chem.</i> , 2006, 45, pp. 4755-4763.

## M22

	<b>Резултат</b>
1	B. Milićević, V. Đorđević, D. Lončarević, J. Dostanić, S. Phillip Ahrenkiel, M. Dramićanin, <b>D. N. Sredojević</b> , N. Švrakić, J. Nedeljković, <b>Charge-transfer complex formation between TiO<sub>2</sub> nanoparticles and thiosalicylic acid: a comprehensive experimental and DFT study</b> , <i>Optical Materials</i> 2017, 73, pp. 163-171.
2	<b>D. N. Sredojević</b> , R. K. Raju, S. Moncho, E. N. Brothers, <b>Mechanism of Ethylene Addition to Nickel Bis(oxathiolene) and Nickel Bis(dioxolene) Complexes</b> , <i>J. Phys. Chem. A</i> 2016, 120 (38), pp. 7561–7568.
3	<b>D. N. Sredojević</b> , P. V. Petrović, G. V. Janjić, E. N. Brothers, M. B. Hall, S. D. Zarić, <b>The Stacking Interactions of Bipyridine Complexes: The Influence of the Metal Ion Type on the Strength of Interactions</b> , <i>J. Mol. Model.</i> , 2016, 22(1), pp.1-9.

4	<b>D. N. Sredojević</b> , D. Vojislavljević, Z. D. Tomić and S. D. Zarić, <b>Parallel stacking interactions in square-planar transition metal complexes containing fused chelate and C6-aromatic rings</b> , <i>Acta Cryst. B</i> 68 2012, pp. 261-265.
---	---

## M23

	РЕЗУЛТАТ
1	<b>D. N. Sredojević</b> , T. Kovač, E. Džunuzović, V. Đorđević, B. N. Grgur, J. M. Nedeljković, <b>Surface-modified TiO<sub>2</sub> powders with phenol derivatives: a comparative DFT and experimental study</b> , <i>Chem. Phys. Lett.</i> 2017, 686, pp. 167–172.
2	V. Đorđević, J. Dostanić, D. Lončarević, S. P. Ahrenkiel, <b>D. N. Sredojević</b> , N. Švrakić, M. Belić, J. M. Nedeljković, <b>Hybrid visible-light responsive Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> particles</b> , <i>Chem. Phys. Lett.</i> 2017, 685, pp. 416-421.
3	<b>D. N. Sredojević</b> , Z. D. Tomić and S. D. Zarić, <b>Influence of metal and ligand types on stacking interactions of phenyl rings with square-planar transition metal complexes</b> , <i>Central European Journal of Chemistry</i> 2007, 5(1), pp. 1-11.

## M32

	РЕЗУЛТАТ
1	<b>D. N. Sredojević</b> , S. E. Moncho, E. N. Brothers, M. B. Hall, <b>Computational Investigation of a Catalyst for Olefin Purification: Copper Bis(oxathiolene) Complexes</b> , 251 <sup>st</sup> ACS National Meeting, San Diego, US, 13-17 March, 2016.
2	<b>D. N. Sredojević</b> , S. E. Moncho, E. N. Brothers, M. B. Hall <b>Ethylene addition to cobalt bis(Thiooxolene): A DFT study</b> , 250 <sup>th</sup> ACS National Meeting, Boston, US, 16-20 August 2015.
3	<b>D. N. Sredojević</b> , E. N. Brothers, M. B. Hall, <b>Olefin Addition to a Nickel bis(Thiooxolene) Complex</b> , First International Computational Science & Engineering Conference, Doha, Qatar, 11-12 May, 2015.

## M33

	РЕЗУЛТАТ
1	S. D. Zarić, G. Janjić, <b>D. Sredojević</b> , D. Veljković, J. Andrić, D. Ninković, P. Petrović, D. Vojislavljević, <b>Noncovalent interactions of aromatic molecules</b> , <i>ACTA CRYSTALLOGRAPHICA A-FOUNDATION AND ADVANCES</i> 2011, 67, 203-204.
2	<b>D. Sredojević</b> , Z. D. Tomić, S. D. Zarić, <b>Stacking interactions between chelate and phenyl rings in square-planar complexes of Cu, Ni, Pt and Pd</b> , Physical chemistry 2006: 8th international conference on fundamental and applied abstract of physical chemistry 2006, 692-694.

	РЕЗУЛТАТ
1	Vesna Đorđević, Jasmina Dostanić, Davor Lončarević, S. Phillip Ahrenkiel, <b>Dušan N. Sredojević</b> , Nenad Švrakić, Jovan M. Nedeljković, <b>Visible-Light Responsive Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Particles</b> , 2 <sup>nd</sup> International Meeting on Materials Science for Energy Related Applications, Belgrade, September 29-30, Physical Chemistry 2016.
2	<b>Dušan N. Sredojević</b> , Edward N. Brothers, Michael B. Hall, <b>Computational Investigation of a Cobalt-based Catalyst for Olefin Separation</b> , 4 <sup>th</sup> TAMUQ Annual Research and Industry Forum, Doha, Qatar, 23 April, 2015.
3	<b>Dušan N. Sredojević</b> , Edward N. Brothers, Michael B. Hall, <b>Computational Investigation of a Nickel-based Catalyst for Olefin Separation</b> , 50 <sup>th</sup> Symposium on Theoretical Chemistry, Vienna, 14-18 September, 2014.
4	<b>Dušan. N. Sredojević</b> , Edward. N. Brothers, Michael. B. Hall, <b>Computational studies on ethylene addition to nickel bis(dioxolene) complex</b> , 3 <sup>rd</sup> TAMUQ Annual Research and Industry Forum, Doha, Qatar, 7 April, 2014.
5	D. Z. Vojislavljević, <b>D. N. Sredojević</b> , S. D. Zarić, <b>Parallel stacking interactions in square-planar transition metal complexes containing fused chelate and C<sub>6</sub>-aromatic rings</b> , Summer School Sofia 2012, SupraChem@Balkans.eu, Sofia, 21-23 May 2012.
6	D. B. Ninković, G. V. Janjić, D. Ž. Veljković, <b>D. N. Sredojević</b> , S. D. Zarić, <b>The interactions between benzene molecules with mutual parallel orientation. Crystallographic and quantum-chemistry analysis</b> , Summer School Sofia 2012, SupraChem@Balkans.eu, Sofia, 21-23 May, 2012.
7	<b>D. N. Sredojević</b> , D. B. Ninković, G. V. Janjić, S. D. Zarić, <b>Stacking interactions of [Ni(acac)<sub>2</sub>] with benzene. Calculated interaction energies</b> , Summer School Sofia 2012, SupraChem@Balkans.eu, Sofia, 21-23 May, 2012.
8	Michael Wedel, Goran Janjić, <b>Dušan Sredojević</b> , Marilena Ferbinteanu, Snežana Zarić, and Horst Borrmann, <b>Significant consequences of subtle changes within two Mn(III) complexes with naften ligand</b> , Second Humboldt Conference on Noncovalent Interactions, Vršac, 22-25 October, 2009.
9	<b>Dušan N. Sredojević</b> , Zoran D. Tomić and Snežana D. Zarić, <b>Chelate-chelate stacking interactions in crystal structures of square-planar transition metal complexes</b> , Second Humboldt Conference on Noncovalent Interactions, Vršac, 22-25 October, 2009.
10	<b>Dušan Sredojević</b> , Crina Daniela Marinescu, Marilena Ferbinteanu, Goran Janjić, and Horst Borrmann, <b>Noncovalent interactions revealed from crystal structures of two Ni (II) mixed ligand complexes with demen and dibm</b> , Second Humboldt Conference on Noncovalent Interactions, Vršac, 22-25 October, 2009.
11	<b>D. N. Sredojević</b> , G. A. Bogdanović, Z. D. Tomić, S. D. Zarić, <b>Stacking vs. CH/π interactions between chelate and aryl rings in crystal structures of square-planar transition metal complexes</b> , XIV Conference of Serbian Crystallographic Society, Vršac, 28-30 June 2007.
12	M. K. Milčić, V. B. Medaković, <b>D. N. Sredojević</b> , N. O. Juranić, S. D. Zarić, <b>Metal-dependent capacity for CH/π interactions of acetylacetonato chelates</b> , XIII Conference of Serbian Crystallographic Society, Novi Sad, 1-3 June 2006.
13	Z. D. Tomić, <b>D. N. Sredojević</b> , S. D. Zarić, <b>Stacking interactions between chelate and phenyl rings in square-planar transition metal complexes</b> , 44. Meeting of Serbian Chemical Society, Belgrade, 6-7 February 2006.
14	<b>D. N. Sredojević</b> , M. K. Milčić, S. D. Zarić,

	<b>Theoretical study of CH/<math>\pi</math> interactions in acetylacetonato complexes,</b> 43. Meeting of Serbian Chemical Society, Belgrade, 24 i 25 January 2005.
15	M. K. Milčić, V. B. Medaković, <b>D. N. Sredojević</b> , N. O. Juranić, S. D. Zarić, <b>Theoretical study of MLAC<math>\pi</math> interactions in acetylacetonato complexes,</b> Second Humboldt conference on computational chemistry, Nessebar, Bulgaria, 1-5 September 2004.

### 3. ПРЕГЛЕД НАУЧНЕ АКТИВНОСТИ КАНДИДАТА

Научно-истраживачка активност кандидата др Душана Сredoјевића, одвија се у оквиру научних тема које припадају областима хемије, физичке-хемије, рачунарске хемије, супрамолекулске хемије, катализе, полимера и наноматеријала. Магистарска и докторска теза су се односиле на анализу кристалографских података из Кембричке кристалографске базе података (CSD) и на квантно-хемијске прорачуне у оквиру супрамолекулске хемије. Из магистарске и докторске тезе је проистекло неколико радова који су високо цитирани (са по приближно 100 цитата), зато што је први пут у свету показано да метало-хелатни прстенови, у квадратно-планарним комплексима прелазних метала, могу да граде стекинг интеракције са фенил прстеновима, као представницима органских ароматичних молекула. Примарни истраживачки фокус, у оквиру постдокторских студија на Тексас А&М Универзитету у Катару, је био усмерен на примену квантно-хемијских израчунавања (посебно ДФТ метода) у циљу осветљавања реакционих механизма који би довели до дизајнирања како хомогених, тако и хетерогених катализатора, за неке важне индустријске процесе, као што су: пречишћавање алкена (олефина), фиксација и редукција угљен диоксида, као и фиксација и добијање водоника. Кандидатов најцитиранији рад (125 цитата) се односи на развијање новог зеолитног материјала (ZIF-67) који би омогућио ефикасно раздвајање пропана од пропилена. Други истраживачки интерес др Душана Сredoјевића је био усмерен на теоријско предвиђање молекулске структуре, као и предвиђање оптичких особина  $\pi$ -коњугованих органских полимера за производњу органских танкослојних транзистора, и фотонапонских соларних ћелија које ефикасно конвертују соларну енергију у електричну. По запошљавању у Институту за нуклеарне науке “Винча”, др Душан Сredoјевић се углавном бави моделовањем различитих хибридних (неорганско-органских) система на бази интерфацијалних комплекса са преносом наелектрисања, користећи модерне методе теорије функционала густине тј. молекулско моделовање на бази ДФТ прорачуна.

Научно интересовање и радови кандидата након одлуке научног већа ИНН „Винча” о предлогу за стицање претходног научног звања могу се тематски груписати у три целине: (1) развијање периодичних молекулских модела за испитивање механизма одређених хемијских реакција катализованих једноатомским (*Single-Atom-Catalysts*) хетерогеним катализаторима на бази модификованих графена и хексагоналног борон-нитрида, (2) ДФТ моделовање органско-неорганских интерфацијалних комплекса са преносом наелектрисања и (3) ДФТ моделовање  $\pi$ -коњугованих органских полимера за примену у органским танкослојним транзисторима и фотонапонским ћелијама.

### 3.1. Развој периодичних модела за испитивање једноатомских катализатора

Кандидат најчешће самостално руководи и реализује истраживања везана за молекулско моделовање у периодичним условима (*periodic boundary conditions*) у циљу дизајнирања нових једноатомских хетерогених катализатора базираних на дефектним графенима и хексагоналном борон-нитриду (*h*-BN), као и других 2Д материјала, који су модификовани јонима различитих прелазних метала. У ову групу спадају истраживања приказана у радовима M21-1, M21-11, M21-13, M22-1 и M23-4 (Табела 1).

У раду **M21-1** „*Effect of surface curvature on the hydrogen storage capacity of the Sc-, Ti-, and V-doped graphene surfaces: Theoretical study*” испитивана је тенденција везивања водоника и азота за различите Sc-, Ti- и V-допирани угљеничне површине (графене, циркумкоронене и циркумтриндене), користећи теорију функционала густине. Израчунате везивне енергије су опсегу од -12 до -22 kJ/mol за један водоников молекул по једном атому прелазног метала. Показано је да је такво везивање одговарајуће за реверзибилни циклус адсорпције и десорпције H<sub>2</sub> молекула. Добијени резултати указују на то да закривљеност модификованих угљеничних површина повећава способност за везивање водоника и азота.

Др Душан Средојевић је као **други аутор** на овом раду направио периодични модел (РВС) и израчунао везивне енергије једног, два и три молекула водоника, као и азота за површине три графена, који су допирани са три различита метала (Sc, Ti, V). Такође је дао детаљну анализу дијаграма електронске густине стања (density of states) рачунајући и приказујући молекулске (Kohn-Sham) орбитале за различите пикове на графицима. Овај рад је проистекао из сарадње са Институтом за физичку хемију и хемијску физику, Технолошког Универзитета у Братислави.

У раду **M23-4** „*Formic acid synthesis by CO<sub>2</sub> hydrogenation over single-atom catalysts based on Ru and Cu embedded in graphene*” је коришћена теорија функционала густине (ДФТ) како би се испитале могућности коришћења једноатомских катализатора на бази дефектних графена, у којима су уграђени јони рутенијума и бакра, у циљу синтезе мравље киселине из угљен диоксида и водоника. Анализирајући резултате прорачуна, дошло се до закључка да је директна CO<sub>2</sub> хидрогенизација спречена услед велике активационе баријере. Међутим, алтернативни механизам који укључује дисоцијацију водоника на рутенијумском центру, који предходи везивању CO<sub>2</sub>, се показао као врло фаворизујући реакциони пут. Такође је показано да Ru и Cu атоми утиснути у графенску матрицу представљају добре кандидате за дизајнирање једноатомских катализатора за ефикасно “хватање” угљен диоксида из атмосфере. Кандидат је као **први аутор** на овом раду осмислио комплетну стратегију и направио одговарајуће периодичне моделе, урадио највећи део прорачуна и анализа. Овај рад је урађен на Тексас A&M Универзитету у Катару у оквиру пројекта NPRP: 7-665-1-125: „Intercalated graphene: effects of substrates on functionalities”.

- ✚ Рад **M21-11** „*Hydrogen Evolution Reaction Over Single-Atom Catalysts Based on Metal Adatoms at Defected Graphene and h-BN*” је детаљно описан у наредном поглављу (4.1.1. Пет најзначајнијих референци кандидата у досадашњем раду).
- ✚ Рад **M21-13** „*Reversible Olefin Addition to Extended Lattices of a Nickel/Selenium Framework*” је детаљно описан у наредном поглављу (4.1.1. Пет најзначајнијих референци кандидата у досадашњем раду).
- ✚ Рад **M22-1** „*Single-Atom Catalysts Supported by Graphene and Hexagonal Boron Nitride: Structural Stability in the Oxygen Environment*” је детаљно описан у наредном поглављу (4.1.1. Пет најзначајнијих референци кандидата у досадашњем раду).

### 3.2. ДФТ моделовање интерфацијалних комплекса са преносом наелектрисања

Друга област истраживања кандидата се односи на развијање модела, како молекулских (кластерних) тако и периодичних, за описивање и предвиђање електронских, оптичких и адсорпционих особина наноматеријала на бази интерфацијалних комплекса са преносом наелектрисања, као и сребрних наночестица. Поред теоријског рада, кандидат је учествовао у активностима везаним за интерпретацију добијених резултата и поређење теоријских са експерименталним резултатима. У ову групу спадају радови M21a-1, M21a-3, M21a-4, M21-2, M21-3, **M21-6**, **M21-7**, M21-8, M21-9, M21-10, M21-12, M21-14, M22-2, M22-3, M23-2 и M23-3 (Табела 1).

У раду **M21a-1** „*Influence of glucose, sucrose, and dextran coatings on the stability and toxicity of silver nanoparticles*” испитивана је стабилност наночестица сребра (15-30 nm) у воденим растворима у присуству глукозе, сахарозе и декстрана. Показано је да стабилност сребрних наночестица расте од глукозе, преко сахарозе, до декстрана тј. са повећањем молекулске тежине молекула угљених хидрата. **Допринос кандидата** се огледао у ДФТ калкулацијама на модел систему Ag<sub>50</sub> кластера, рачунајући парцијална атомска наелектрисања и адсорпционе енергије у циљу објашњења повећане стабилности обложених сребрних наночестица.

У раду **M21a-3** „*Acute toxicity study in mice of orally administrated TiO<sub>2</sub> nanoparticles functionalized with caffeic acid*” је испитивана акутна токсичност површински модификованих TiO<sub>2</sub> наночестица са кафеинском киселином (СА) и поређена са токсичношћу одвојених конституената. Добијени резултати су указали да су саме наночестице TiO<sub>2</sub> токсичније од комплекса са преносом наелектрисања између наночестице TiO<sub>2</sub> и кафеинске киселине. Пре *in vivo* експеримената, интерфацијални комплекси са преносом наелектрисања (TiO<sub>2</sub>/СА) су потпуно експериментално и теоријски окарактерисани. **Допринос кандидата** се односи на теоријско моделовање TiO<sub>2</sub>/СА система користећи одговарајући кластерни модел.

У раду **M21a-4** „*Immobilization of dextranucrase on functionalized TiO<sub>2</sub> supports*” испитивана је могућност коришћења наночестица интерфацијалних комплекса са преносом наелектрисања као могућих носиоца за имобилизацију ензима. Добијени

результати су показали да се оваквом методом може дефинисати функционална група на површини наночестице која је одговорна за ковалентно везивање ензима, и тако добије имобилисани ензим који има побољшану активност са могућношћу вишекратног коришћења. **Допринос кандидата** се односио на нумеричке симулације коришћењем периодичног модела који је служио за описивање електронске структуре анатаса ( $\text{TiO}_2$ ), површински модификованог 5-амино салицилном киселином.

У раду **M21-2** „*Photon-driven bactericidal performance of surface-modified  $\text{TiO}_2$  nanofibers*” је показано да титан диоксидна нановлакна која су утиснута у графит и површински модификована родизоничном киселином (RhA) показују биолошке ефекте против *E. coli* и *S. Aureus*, када се активирају видљивом светлошћу. Поред потпуне експерименталне карактеризације, оптичке особине неорганско-органског хибрида су такође детаљно проучаване користећи савремене ДФТ методе на кластерном систему, у чему се огледа **допринос кандидата** у овом раду. Кандидат је конструисао  $[\text{Ti}_{18}\text{O}_{33}(\text{OH})_6]$  кластер, узимајући у обзир (101) кристалографску раван анатаса ( $\text{TiO}_2$ ), како би дао детаљан опис оптичких особина  $\text{TiO}_2/\text{RhA}$  хибридног система.

У раду **M21-3** „*Photocatalytic ability of visible-light-responsive hybrid  $\text{ZrO}_2$  particles*” испитивани су интерфацијални комплекси са преносом наелектрисања, између цирконијум диоксида ( $\text{ZrO}_2$ ) и 5-аминосалицилне киселине (5-ASA), као системи који апсорбују видљиву светлост. Слободне аминок групе, које су присутне на површини наночестица, су искоришћене како би редуковале јоне сребра и везале сребрне наночестице за површину  $\text{ZrO}_2$ . **Допринос кандидата** се огледа у коришћењу теорије функционала густине (ДФТ), на одговарајућем молекулском (кластерном) систему, у циљу објашњења оптичких промена у хибриду које се огледају у померању апсорпције ка црвеном делу спектра у односу на одвојене конституенте.

Рад **M21-6** „*Toxicity of Silver Nanoparticles Supported by Surface-Modified Zirconium Dioxide with Dihydroquercetin*” је детаљно описан у наредном поглављу (4.1.1. Пет најзначајнијих референци кандидата у досадашњем раду).

Рад **M21-7** „*Interfacial charge transfer complex formation between silver nanoparticles and aromatic amino acids*” је детаљно описан у наредном поглављу (4.1.1. Пет најзначајнијих референци кандидата у досадашњем раду).

У раду **M21-8** „*Interfacial charge transfer complex between  $\text{TiO}_2$  and non-aromatic ligand squaric acid*” је показано да везивање скваричне киселине (squaric acid), неароматичног молекула, за површину  $\text{TiO}_2$  праха узрокује оптичку апсорпцију, у видљивом делу спектра, као резултат интерфацијалних прелаза са преносом наелектрисања. Оптичка карактеризација синтетисаног хибридног материјала је допуњена теоријским делом, који се односи на примену методе теорије функционала густине (ДФТ), што у потпуности представља **допринос кандидата** овом раду. Енергетски процеп између највише попуњене молекулске орбитале лиганда (НОМО) и почетка проводне траке (СВМ) титан диоксида се може довести у везу са прагом апсорпције у видљивом делу спектра. У овом раду је такође коришћена електронска парамагнетна резонантна спектроскопија (EPR) како би се детектовале парамагнетне врсте које настају услед озрачивања узорка ултра-љубичастом и видљивом светлошћу.



У раду **M21-9** „*Surface-modified ZrO<sub>2</sub> nanoparticles with caffeic acid: Characterization and in vitro evaluation of biosafety for placental cells*” је испитивана токсичност наночестица ZrO<sub>2</sub> модификованих кафеинском киселином на ћелијама плаценте. Такође, урађена је синтеза и карактеризација интерфацијалних комплекса са преносом наелектрисања између молекула кафеинске киселине и наночестица ZrO<sub>2</sub>. Добијени резултати показују да кафеинска киселина на површини наночестица ZrO<sub>2</sub> повећава токсични ефекат према ћелијама плаценте. **Допринос кандидата** на овом раду је дат у виду нумеричких калкулација на бази ДФТ метода уз помоћ пажљиво дизајнираног кластера. Израчуната је тотална и парцијална густина стања (TDOS/PDOS) [Zr<sub>11</sub>O<sub>20</sub>(OH)<sub>2</sub>]/CA кластера и показано да интерфацијални електронски прелази постоје између највише попуњене молекулске орбитале кафеинске киселине и непопуњених стања ZrO<sub>2</sub> кластера.

У раду **M21-10** „*Tuning properties of cerium dioxide nanoparticles by surface modification with catecholate-type of ligands*” је описана површинска модификација церијум диоксидних (CeO<sub>2</sub>) честица у циљу подешавања њихових особина за примену у пољу биомедицине. Стабилан водени раствор CeO<sub>2</sub>, који се садржи кристале 3 до 4 nm у величини, је синтетисан користећи принудну хидролизу. Координација деривата катехола (катехол, кафеинска киселина, тирон и допамин) за површинске атоме церијума је праћена појавом апсорпције у видљивом делу спектра, као последица интерфацијалних прелаза са преносом наелектрисања. **Допринос кандидата** се огледа у конструкцији молекулских кластера, опште формуле L/[Ce<sub>6</sub>O<sub>8</sub>(OH)<sub>6</sub>], како би се допунили и детаљно објаснили оптички феномени који се односе на интерфацијалне прелазе.

У раду **M21-12** „*Interfacial Charge-Transfer Transitions in Colloidal TiO<sub>2</sub> Nanoparticles Functionalized with Salicylic Acid and 5-Aminosalicylic Acid: A Comparative Photoelectron Spectroscopy and DFT Study*” је коришћена вакуумска ултраљубичаста фотоелектронска спектроскопија (VUV PES) како би се одредили јонизациони потенцијали изолованих TiO<sub>2</sub> наночестица које су површински модификоване салицилном киселином (SA) и 5-аминосалицилном киселином (5-ASA). VUV PES мерења су указала на померање прага апсорпције од 7.2 eV, који је типичан за немодификоване TiO<sub>2</sub> наночестице, ка вредностима од 6.5 и 5.9 eV за површински модификоване наночестице са SA и 5-ASA молекулима. **Допринос кандидата** се огледа у детаљном опису оптичких особина површински модификованих TiO<sub>2</sub> наночестица са SA и 5-ASA, користећи ДФТ израчунавања на периодичним (PBC) и кластерним моделима. Показало се да периодични модели дају добар опис електронских стања оксидних површина функционализованих малим органским молекулима, док кластерни модели дају одлично слагање између израчунатих и експериментално одређених енергетских процепца.

У раду **M21-14** „*Visible light absorption of surface modified Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> powders: A comparative DFT and experimental study*” је урађена површинска модификација Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> прахова користећи сол-гел синтетички приступ. Свеобухватна микроструктурална карактеризација, укључујући трансмисиону електронску микроскопију, дифракциону анализу X-зрацима и азотне адсорпционо-десорпционе изотерме, открива да се γ-кристалични алуминијумски прахови састоје од мезопорозних честица у опсегу од 0.1 до 0.3 μm, са специфичном површином од 54.8 m<sup>2</sup>/g и порама у радијусу између 3 и 4 nm. Израчунавања на бази теорије функционала густине (ДФТ), у периодичним

условима (PBC), су ураћена у циљу процене величине енергетских процепа различитих неорганско-органских хибрида, у чему је главни **допринос кандидата** у овом раду. Израчунате вредности се јако добро слажу са експерименталним подацима, што указује на предиктивну могућност теоријског моделовања.

У раду **M22-2** „*Electronic structure of surface complexes between CeO<sub>2</sub> and benzene derivatives: A comparative experimental and DFT study*” је описана површинска модификација CeO<sub>2</sub> нано-прахова, који су синтетисани методом само-пропагације, на собној температури, са лигандима на бази салицилне киселине (SA, 5-ASA) и катехола (CAT, 3,4-DHBA, CA, 2,3-DHN). Оваква модификација CeO<sub>2</sub> нано-прахова индукује појављивање апсорбције у видљивом делу спектра захваљујући интерфацијалним прелазима са преносом наелектрисања. **Допринос кандидата** у овом раду се односи на теоријско моделовање, на бази теорије функционала густине, у циљу процене позиције енергетских нивоа у овим неорганско-органским хибридним материјалима. Добијено је добро слагање између израчунатих вредности и експерименталних података.

У раду **M22-3** „*Visible-light-responsive surface-modified TiO<sub>2</sub> powder with 4-chlorophenol: A combined experimental and DFT study*” је описана синтеза неорганско-органског хибридног материјала површинском модификацијом комерцијалног TiO<sub>2</sub> праха (Degussa P25) са 4-хлорофенолом. Оптичка апсорпција хибридног материјала је померена ка црвеном делу спектра у односу на чист TiO<sub>2</sub> прах, захваљујући формирању интерфацијалног комплекса са преносом наелектрисања. Експериментални резултати су допуњени теориским моделовањем користећи ДФТ методе на одоварајућим кластерним системима, у чему је главни **допринос кандидата** на овом раду. Израчунати електронски прелази су у доброј сагласности са измереним рефлексиним спектрима површински модификованог TiO<sub>2</sub> праха са 4-хлорофенолом. Парамагнетне врсте, генерисане у немодификованом и површински модификованом TiO<sub>2</sub> праху, након екситације ултраљубичастим и видљивим светлом су идентификоване користећи електронску парамагнетну резонантну спектроскопију (EPR).

У раду **M23-2** „*Efficiency of interfacial charge transfer complex between TiO<sub>2</sub> nanoparticles and caffeic acid against DNA damage in vitro: combinatorial analysis*” су испитивана генотоксична и антигенотоксична понашања интерфацијалних комплекса са преносом наелектрисања између наночестица TiO<sub>2</sub> и кафеинске киселине (CA), у *in vitro* експериментима. Формирање интерфацијалних комплекса индукује појаву апсорпције у видљивом делу спектра. **Допринос кандидата** у овом раду се своди на нумеричке симулације, користећи ДФТ методе, на кластерном молекулском моделу. Израчунати спектри изоловане кафеинске киселине и [Ti<sub>18</sub>O<sub>33</sub>(OH)<sub>6</sub>] кластера су у доброј сагласности са одговарајућим измереним спектрима, као и са одговарајућим подацима из литературе.

У раду **M23-3** „*Visible light absorption of surface modified TiO<sub>2</sub> nanoparticles with vitamin B<sub>6</sub>: a comparative experimental and DFT study*” је ураћена површинска модификација наночестица титан диоксида са биолошки активним молекулом (витамином B<sub>6</sub>). Праг апсорпције површински-модификованих TiO<sub>2</sub> узорака је померен за око 0.4 eV ка црвеном делу спектра у односу на немодификоване честице. Експериментални налази су допуњени детаљним кванто-хемијским израчунавањима на бази теорије функционала густине (ДФТ), у чему се огледа **кандидатов допринос**. Добијено је добро слагање

између експерименталних апсорпционих спектра и теоријских електронских ексцитационих спектра на одговарајућим модел системима.

### 3.3. Развој органских полимера за примену у електронским и оптичким уређајима.

Трећа област истраживања кандидата се односи на молекулско моделовање  $\pi$ -коњугованих органским полимера, користећи периодичне и молекулске (кластерне) моделе, за описивање и предвиђање архитектуре синтетисаних полимера, као и њихових електронских и оптичких особина. Поред теоријског рада, кандидат је учествовао у активностима везаним за интерпретацију добијених резултата и поређење теоријских са експерименталним резултатима. У ову групу спадају радови M21a-2, M21-4 и M21-5 (Табела 1).

У раду **M21a-2** „*Indacenodithiazole Ladder Type Bridged Di(thiophene)-Difluoro-Benzothiadiazole Conjugated Copolymers as Ambipolar Organic Field Effect Transistors*” су синтетисана четири нова донор-акцептоска коњугована полимера, са линеарним и разгранатим бочним групама, који су засновани на индацено-дитиазолском (IDTz) лиганду. Проучавање су њихове оптичке, електрохемијске и термичке особине, као и особине преноса наелектрисања за примену у органским танкослојним транзисторима. Детаљна ДФТ израчунавања су урађена како би се проценио ефекат замене тиофенског лиганда са тиазолским, у циљу праћења електронских, оптичких и преносних особина полимера, у чему се огледа **допринос кандидата** у овом раду.

У раду **M21-4** „*Organic memory devices and synaptic simulation based on indacenodithienothiophene (IDTT) copolymers with improved planarity*” је представљена синтеза три нова индаценодитиено-[3,2-b] тиофенска  $\pi$ -коњугована полимера (IDTT). Утицај ко-мономерних електричних особина на термичка, оптичка и електрохемијска својства полимера је детаљно проучаван. На основу синтетисаних полимера конструисани су органски транзистори са ефектом поља (OFETs) и три терминална меморијска уређаја. Показало се да, услед повећане планарности, оба уређаја (OFET као и меморијски) испољавају одличне проводне особине и велики меморијски капацитет. **Допринос кандидата** се огледа у теоријском моделовању ових полимера у циљу осветљавања њихових проводних особина. Унутрашње реорганизационе енергије, које рефлектују структурна прилагођавања услед примљеног наелектрисања, су израчунате. На основу ДФТ прорачуна кандидат је такође показао да замена електрон-суфицидног тиофена са електрон-дефицичним тиазолом доводи до смањења енергије за оба типа транспорта (шупљина и електрона). Са друге стране, повећање величине самог мономера, у **P3** полимеру, доводи до повећања енергије за транспорт шупљина.

У раду **M21-5** „*Molecular strategy towards ROMP-derived hyperbranched poly(olefin)s featuring various  $\pi$ -bridged perylene diimides*” представљена је серија цикло-олефинских мономера, заснованих на оксаноборненским имидами, који су везани за *bay*-регион периленских диимидних деривата за добијање А-Д-А типа хромофора унутар хипер-разгранатих полимера. Фотофизичке особине, као и молекулске структурне особине свих мономера и полимера су испитиване користећи UV-Vis и флуоресцентну спектроскопију, на тај начин осветљавајући различите фазе организације у раствору

након полимеризације и формирања филмова. Нумеричке симулације су коришћене како би се сагледала архитектура ових полимера и објасниле њихове електронске и оптичке особине, у чему се огледа **допринос кандидата** у овом раду. Постигнуто је добро слагање теоријских и експерименталних UV-Vis спектра, као и величине енергетских процеса ових полимера.

## 4. ЕЛЕМЕНТИ ЗА КВАЛИТАТИВНУ АНАЛИЗУ РАДА КАНДИДАТА

### 4.1. Научни ниво и значај резултата, утицај научних радова

#### 4.1.1. Пет најзначајнијих референци кандидата у досадашњем раду

1. **Dušan N. Sredojević**, Milivoj R. Belić, Željko Šljivančanin

**Hydrogen Evolution Reaction Over Single-Atom Catalysts Based on Metal Adatoms at Defected Graphene and *h*-BN**

*J. Phys. Chem. C* 124, 31 (2020) 16860–16867

У овом раду је уз помоћу метода теорије функционала густине (ДФТ) урађена детаљна теоријска претрага како би се пронашли ефикасни једно-атомски (SACs) хетерогени катализатори, засновани на дефектном графену и хексагоналном борон нитриду (*h*-BN), у којима су утиснути прелазни метали. Показало се да дефектна места (једноатомске шупљине) ових материјала делују као везивна места која чврсто држе метале везане за површину и спречавају агрегацију у веће кластере. Ефикасност ових катализатора је проучавана испитивањем њихове способности да адсорбују водоникове атоме и рекомбинују их у H<sub>2</sub> молекуле, на термодинамички неутралан начин. Главни корак у процесу добијања водоника (*the hydrogen evolution reaction*; HER) је моделован користећи девет различитих прелазних метала који су везани за једноатомске шупљине графена и хексагоналног борон-нитрида. Теоријски прорачуни су довели до резултата који указују да неколико кандидата задовољава услов готово идеално равне енергетске потенцијалне површине за реакцију издвајања водоника, која је упоредива, или чак повољнија, у односу на ону која је утврђена за површину платине. Наиме, атоми Ru, Os и Co који су везани за *h*-BN претстављају посебно погодно окружење за адсорпцију водоника, са готово нултом променом слободне енергије за адсорпцију два атома водоника за Ru/*h*-BN и малим вредностима од -0.02, 0.08 и -0.13 eV за Os/*h*-BN, Pd/*h*-BN и Co/*h*-BN. Ово је праћено повољном кинетиком за даљу рекомбинацију у H<sub>2</sub> молекул. Израчунате активационе баријере за рекомбинацију су у опсегу од 0.04 до 0.16 eV, што чини сам процес спонтаним на собној температури. **Кандидат је осмислио дату тему и заједно са ауторима спровео сва теоријска истраживања, анализирао све резултате и написао дати рад, који је за кратко време јако пуно цитиран у одличним часописима са високим импакт фактором.**

2. **D. N. Sredojević**, S. Moncho, R. K. Raju, M. R. Belić, E. N. Brothers

**Reversible Olefin Addition to Extended Lattices of a Nickel/Selenium Framework**

*J. Phys. Chem. C* 122 (2018) 22424–22434

У овом раду су проучаване структурне и електронске особине нових танкослојних (2Д) материјала, опште формуле  $[\text{Ni}(\text{XC})_4]_n$  ( $\text{X} = \text{Se}, \text{S}$ ), као и њихова склоност ка везивању алкена (олефина), користећи ДФТ методе. Показано је да је механизам циклоадиције етилена за периодични, хипотетички  $[\text{Ni}(\text{SeC})_4]_n$  дводимензионални материјал аналоган предходно описаном синтетисаном 2Д материјалу  $[\text{Ni}(\text{SC})_4]_n$ , као и бис(дителиоленским) молекулским комплексима опште формуле  $[\text{M}(\text{S}_2\text{C}_2\text{R}_2)_2]$  ( $\text{M} = \text{Ni}, \text{Pd}, \text{Pt}, \text{Co}, \text{Cu}$ ). Прорачуни су показали да ови нанослојни материјали не би били подложни распадању у интеракцијама са алкенима, што је особено за молекулске бис(дителиоленске) комплексе ограничавајући њихову примену. Такође је показано да ови материјали могу да постоје у двослојном и мултислојном облику (као 3Д структуре) које су стабилизоване *van der Walls*-овим интеракцијама, са формирањем пора до 12 Å у пречнику. Ово указује на велики капацитет за везивање олефина и захваљујући осталим физичко-хемијским особинама, ови материјали би могли да буду потенцијални кандидати за развој нових електрокатализатора за процес пречишћавања олефина. **Кандидат је као први аутор на овом раду осмислио комплетну стратегију и направио одговарајуће 2Д и 3Д молекулске моделе, урадио највећи део прорачуна и анализа и написао рад.**

3. **D. N. Sredojević**, Milivoj R. Belić, Željko Šljivančanin

**Single-Atom Catalysts Supported by Graphene and Hexagonal Boron Nitride: Structural Stability in the Oxygen Environment**

*J. Phys. Chem. C* 126 (2022) 8637–8644

У овом раду је први пут урађена детаљна теоријска студија структурне стабилности једноатомских (SACs) хетерогених катализатора, заснованих на дводимензионалним материјалима на бази модификованих графена и хексагоналних борон нитрида (*h*-BN), у присуству атмосферских услова тј. молекулског кисеоника. Користећи теорију функционала густине, испитана је структурна стабилност атома метала који су утиснути у моно-атомске ваканције графена и *h*-BN у присуству кисеоника ( $\text{O}_2$ ). У разматрање је узето 30 различитих прелазних метала, укључујући и племените метале. Резултати прорачуна су указали на то да највећа стабилност постоји код оних структура у којима недостаје боров атом у *h*-BN материјалу. Структурна стабилност је такође очувана за већину прелазних метала утиснутих у моно-атомске ваканције графена. Најмања стабилност SACs је код оних структура у којима су атоми метала везани за шупљине које настају услед недостајућих азотових атома у *h*-BN. Показано је да генерална слика структурне стабилности SACs у кисеоничном окружењу може бити дата поређењем везивних енергија кисеоника за атоме метала на три дефектне површине. У раду су такође представљене детаљне електронске структуре у облику графика густине стања (*density of states*) одређених релевантних врста. **Кандидат је као први аутор на овом раду осмислио стратегију и направио одговарајуће периодичне молекулске моделе**

дефектних графена и *h*-BN са утиснутим атомима прелазних метала, урадио највећи део прорачуна и анализа и делимично написао рад.

4. **D. Sredojević**, V. Lazić, A. Pirković, J. Periša, N. Murafa, B. Spremo-Potparević, L. Živković, D. Topalović, A. Zarubica, M. Jovanović Krivokuća, J. M. Nedeljković  
**Toxicity of Silver Nanoparticles Supported by Surface-Modified Zirconium Dioxide with Dihydroquercetin**  
*Nanomaterials* 12 (2022) 3195-3211

У овом раду су проучаване антибактеријске особине и цитотоксичност сребрних наночестица на неорганско-органским хибридним нано-праховима, који се састоје од цирконијум диоксида ( $\text{ZrO}_2$  NPs) и дихидрокварцетина (DHQ), против Грам (-) бактерија *Escherichia coli* и Грам (+) бактерија *Staphylococcus aureus* као и против људских ћелија канцера HeLa. Површинска модификација  $\text{ZrO}_2$  NPs, која је синтетисана сол-гел методом, са DHQ води ка формирању интерфацијалних комплекса са преносом наелектрисања, на шта указује појава апсорпције у видљивом делу спектра. Припремљени узорци су потпуно окарактерисани, а спектроскопски налази допуњени прорачунима на бази теорије функционала густине, користећи молекулске (кластерне) моделе, у чему се огледа **главни допринос кандидата**. Кандидат је урадио све ДФТ и временски-зависне ДФТ прорачуне с циљем проучавања електронских и оптичких особина формираних хибридних комплекса насталих адсорпцијом DHQ молекула на површину  $\text{ZrO}_2$  нано-честица. Коришћен је  $[\text{Zr}_{11}\text{O}_{20}(\text{OH})_4]$  кластерни модел који је направљен на основу моноклиничне кристалне структурне решетке цирконијум диоксида ( $\text{P}2_1/c$ ), у складу са (111) кристалографском равни. Теоријски прорачуни су пружили детаљно објашњење експерименталних резултата.

**Кандидат је као први аутор на овом раду осмислио комплетну стратегију и направио одговарајуће кластерне системе за теоријско моделовање. Такође је учествовао у анализи добијених података и њиховом поређењу са експерименталним подацима, као и у писању рада.**

5. **D. Sredojević**, S. Stavrić, V. Lazić, S. P. Ahrenkiel, J. M. Nedeljković  
**Interfacial charge transfer complex formation between silver nanoparticles and aromatic amino acids**  
*Phys. Chem. Chem. Phys.* 24 (2022) 16493-16501

Оптичке особине површински модификованих сребрних наночестица ( $\text{Ag}$  NPs) са ароматичним аминокиселинама триптофаном (Trp) и хистидином (His) проучаване су користећи ДФТ методе и временски-зависне ДФТ методе на кластерним моделима. Редистрибуција наелектрисања након хемисорпције молекула аминокиселина на површини сребрних наночестица је такође одређена теоријским методама. Добијени теоријски подаци, са једне стране, недвосмислено указују на формирање интерфацијалних комплекса са преносом наелектрисања (ICT) између сребрних наночестица и аминокиселина. Са друге стране, парцијална оксидација површинских атома сребра је праћена повећањем електронске густине на молекулима лигананда.

Формирање ICT комплекса заснованих на наночестицама племенитих метала никада раније није описана у литератури. Експериментална спектроскопска мерења подржавају теоријске налазе. Такође је показано да се нова апсорбциона трака у видљивом делу спектра појављује након површинске модификације Ag NPs. Када се изложе на ваздуху, површински модификоване Ag NPs се брже оксидују у односу на немодификоване сребрне наночестице. **Кандидат је као први аутор на овом раду урадио готово све прорачуне и написао теоријски део рада. Такође је осмислио стратегију на основу које је објашњена кинетика оксидације сребрних наночестица након површинске модификације аминокиселинама.**

#### 4.1.2. Позитивна цитираност научних радова кандидата

Списак литературе у којој су афирмативно цитирани публиковани резултати кандидата налази се у приложеном материјалу. Према „SCOPUS” индексној бази, у периоду од 2006-2023. године, **47** радова др Душана Средојевића је цитирано **931** пут без аутоцитата, односно 1035 пута са аутоцитатима. Хиршов индекс кандидата износи **18** (19 са аутоцитатима). Просечна хетероцитираност по раду је **19,8**.

Радови објављени након избора у звање виши научни сарадник цитирани су у:

*Materials Advances* (IF=29.40), *Coordination Chemistry Reviews* (IF=24.833), *Nano Energy* (IF=17.881), *Bioactive Materials* (IF= 16.874), *Journal of the American Chemical Society* (IF=15.00), *Advances in Colloid and Interface Science* (IF=12.984), *ACS Applied Materials and Interfaces* (IF=9.50), *Environmental Science: Nano* (IF=9.473), *Nanoscale* (IF=8.307), *International Journal of Biological Macromolecules* (IF=8.20), *Journal of Materials Chemistry C* (IF=8.067), *Analytical Chemistry* (IF=8.008), *Journal of Environmental Chemical Engineering* (IF=7.968), *Biomaterials Advances* (IF=7.90), *International Journal of Hydrogen Energy* (IF=7.139), *Communications Chemistry* (IF=6.581), *Surfaces and Interfaces* (IF=6.20), *Macromolecules* (IF=5.50), *Dyes and Pigments* (IF=5.122), *Molecules* (IF=4.927), *Nanoscale Advances* (IF=4.70), *Materials Science in Semiconductor Processing* (IF=4.644), *Food and Chemical Toxicology* (IF=4.60), *Journal of Electroanalytical Chemistry* (IF=4.598), *Journal of Organic Chemistry* (IF=4.198), *Physical Chemistry Chemical Physics* (IF=3.945), *RSC Advances* (IF=3.90), *Catalysts* (IF=3.90), *Journal of Nanomaterials* (IF=3.791), *Journal of Physical Chemistry C* (IF=3.70), *Nanotechnology* (IF=3.50), *Review Materials* (IF=3.40), *Polymer International* (IF=3.213), *Physical Organic Electronics* (IF=3.20), *Polymer Journal* (IF=2.70), и др.

Хронолошка листа свих цитираних радова, као и листа радова цитираних после избора у звање виши научни сарадник дати су у прилогу (**Остала документа од значаја**).

#### 4.1.3. Параметри квалитета часописа

Резултати научно-истраживачког рада др Душана Средојевића су **до сада** публиковани у оквиру **47** научна радова, од чега **7** научних радова су публикована у међународним часописима изузетних вредности (катеорије **M21a**), **26** у врхунским међународним

часописима (катеорије **M21**), **7** у истакнутим међународним часописима (**M22**), и **7** у међународним часописима категорије **M23**. У периоду након избора у звање **виши научни сарадник**, др Душан Средојевић је објавио: **25** радова од чега је **4** рада у међународним часописима изузетних вредности (**M21a**) категорије, **14** радова је публикувао у врхунским међународним часописима (**M21**), **3** у истакнутим међународним часописима (**M22**), а **4** у међународним часописима (**M23**), дато у прилозима 1 и 2.

Просечан број аутора по раду у периоду након одлуке научног већа ИНН „Винча” о предлогу за стицање претходног научног знања је 7.56. Укупни индекс компетентности (Импакт фактор) свих објављених радова кандидата износи 192,336, а након избора у звање виши научни сарадник је **108,794**. Збир импакт фактора по категоријама након избора у звање Виши научни сарадник је следећи: у категорији M21a је 26,528, у категорији M21 је 66,928, у категорији M22 је 9,887, а у категорији M23 је 5,451. Просечан импакт фактор часописа у којима су објављени радови др Душана Средојевића је 4,092, а након избора у звање виши научни сарадник је **4,352**. Укупан импакт фактор нормализован по импакту цитирајућег чланка (SNIP) радова објављених после избора у звање виши научни сарадник је 24,421.

Укупан збир **M** фактора часописа у којима су објављени радови кандидата након избора у звање виши научни сарадник је 184, односно кориговани број поена у складу са Правилником о стицању истраживачких и научних звања (Сл. гласник РС, број 159/2020), Прилог 1, поглавље 1.4.) износи **151,572**.

	<b>ИФ</b>	<b>M</b>	<b>СНИП</b>
Укупно	108,794	184/* <b>151,572</b>	24,421
Усредњено по чланку	4,352	7,36/6,06	0,977
Усредњено по аутору	14,391	24,34/20,05	3,23

Параметри и категоризација часописа у којима је кандидат објављивао радове од претходног избора у звање дати су у Табели 1.

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

Од **25** M20 радова објављених након одлуке научног већа ИНН „Винча” о предлогу за стицање претходног научног звања, кандидат је био први аутор на **7** радова, други аутор на **3** рада и контакт-одговорни аутор на **7** радова.

Реализација и руковођење истраживањима кандидат остварује кроз рад у групи за наноматеријале у Лабораторији за радијациону хемију и физику ИНН „Винча” на теми „Функционални наноматеријали и полимерни нанокомпози” у оквиру Потпрограма Д: Неоргански и хибридни материјали, Програма 1. Нови материјали и нанонауке. Као што



је приказано у опису радова објављених од стицања претходног звања, кандидат је активно руководио и учествовао у осмишљавању и реализацији истраживања везаних за теоријско моделовање интерфацијалних комплекса са преносом наелектрисања између оксида метала и малих органских ароматичних молекула на бази катехола, фенола и салицилне киселине, као и неких неароматичних цикличних молекула. Такође, је учествовао у теоријском моделовању, користећи методе теорије функционала густине (ДФТ и ТД-ДФТ), наночестица сребра које су обложене молекулима шећера или хемисорбоване аминокиселинама. Кандидат је својим базичним знањем и искуством из теоријске и рачунарске хемије дао значајан допринос у развоју како молекулских (кластерних), тако и периодичних (РВС) модела за квантно-хемијске прорачуне, углавном на бази теорије функционала густине (ДФТ), који су у стању да опишу различите физичко-хемијске особине наноматеријала и молекула. Његови модели често дају резултате који су у доброј сагласности са експерименталним подацима и у домену су предиктабилности.

Кандидат још увек активно сарађује са неколико група на Тексас А&М Универзитету у Катару, где је провео око 6 година у оквиру различитих постдокторских студија. Прва група је предвођена Проф. др Edward Brothers-ом, у оквиру чијег истраживачког пројекта се бавио проблемом пречишћавања олефина (радови објављени након избора у предходно звање су **M21-13** и **M23-1**). Друга истраживачка група је предвођена Проф. др Миливојем Белићем, у оквиру чијег пројекта је развио неколико периодичних модела, који се односе на модификоване 2Д материјале, и детаљно испитао реакционе механизме који се односе на индустријски важне процесе као што су добијање водоника и редукција и фиксација угљен диоксида (**M21-11**, **M22-1**, **M23-4**). Трећа истраживачка група је под руководством Проф. др Mohammed Al-Nashimi-ја, у оквиру чијих се пројеката бавио развијањем периодичних модела у циљу испитивања геометријских и проводних, као и електронских и оптичких особина  $\pi$ -коњугованих органских полимера за примену у органским танкослојним транзисторима и фотонапонским уређајима (радови објављени након избора у предходно звање су **M21a-2**, **M21-4** и **M21-5**).

У оквиру билатералног пројекта сарадње са Универзитетом Минхо у Браги, Португалија, учествовао је на два рада који се односе на површинску модификацију наночестица сребра са глукозом, сахарозом и декстраном (**M21a-1**), као и церијум диоксида ( $\text{CeO}_2$ ) са катехолатним типом лиганата (**M21-10**). Кроз мултилатералну сарадњу Дунавског региона између Универзитета у Братислави, Словачка и Универзитета у Острави, Чешка такође има сарадњу и радови проистекли из ове сарадње су **M21-1**, **M21-8** и **M22-3** (Табела 1). Остварио је сарадњу и са Универзитетима у Шангају, Кина и Ванкуверу, Канада из које је проистекао рад који се односи на површинску модификацију  $\text{TiO}_2$  нановлакна и њихову антибактеријску примену (**M21-2**).

## 4.2. Ангажованост у формирању научних кадрова

- Кандидат је **институтски ментор** на изради докторске дисертације студенткиње Миљане Дукић, истраживача приправника Института за нуклеарне науке „Винча”, Института од националног значаја за Републику Србију, студента докторских студија, Универзитета у Београду (**Прилог: Руковођење НИ пројектима или менторство**).
- Кандидат је био члан комисије за избор у звање научни сарадник др Слађане Доронтић запошљене у Институту за нуклеарне науке „Винча”, Институту од националног значаја за Републику Србију (**Прилог: Остала документа од значаја**).

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

Радови које је др Душан Средојевић објавио у периоду након одлуке Научног већа о предлогу за стицање звања виши научни сарадник спадају у експерименталне и радове са нумеричким симулацијама. Од **25** радова М20 категорије **13** радова није захтевало нормирање. Радови **M21a-3** и **M21-3** имају по **8** аутора и нормирани су према правилима за експерименталне радове. Радови **M21a-4**, **M21-2**, **M21-14** и **M23-2** имају по **9** аутора и нормирани су према правилима за експерименталне радове. Радови **M21-9**, **M21-12** и **M22-2** имају по **10** аутора и нормирани су према правилима за експерименталне радове. Радови **M21-4** и **M21-6** имају по **11** аутора и нормирани су према правилима за експерименталне радове. Док рад **M21a-2** има **15** аутора и нормиран је према правилу за експерименталне радове.

## 4.4. Руковођење пројектима, потпројектима и пројектним задацима

Др Душан Средојевић руководи једним међународним пројектом (**Прилог: Руковођење НИ пројектима или менторство**)

- Пројекат мултилатералне научне и технолошке сарадње у дунавском региону (337-00-140/2023-05/08): „*Мултифункционални хибридни материјали на бази ZnO за санацију отпадних вода*“, (2023-2025).

Др Душан Средојевић руководи подпројектним задатком (**Прилог: Руковођење потпројектима и пројектним задацима**)

- У оквиру пројекта „*Материјали редуковане димензионалности за ефикасну апсорпцију светлости и конверзију енергије*“ (бр. 45020), чија је реализација започела 2011. године, под руководством др Јована Недељковића, научног саветника, Института за нуклеарне науке „Винча”, Института од националног значаја за Републику Србију, др Душан Средојевић руководи задацима који се односе на теоријско (ДФТ) моделовање различитих хибридних система на бази интерфацијалних комплекса са преносом наелектрисања.

#### 4.5. Остали показатељи успеха у научном раду

Др Душан Средојевић је у току свог досадашњег рада презентовао два предавања по позиву (**Прилог: Остала документа од значаја**):

- Позивно предавање на Конференцији **EMN Rome Meeting 2019** у Риму, Италија, одржане између 13. и 17. маја 2019. године.  
Назив предавања: *Reduction of CO<sub>2</sub> into formic acid over the heterogeneous single-atom catalysts*
- Позивно предавање на Конференцији **ASC Research Conference: Chemistry and Chemical Engineering in MENA** у Дохи, Катар, одржане између 9. и 11. маја 2022. године.  
Назив предавања: *Hydrogen evolution catalyzed by metal-decorated defected graphene and hexagonal boron-nitride*

Кандидат је био рецензент у следећим научним часописима (**Прилог: Остала документа од значаја**)

- *The Journal of Physics and Chemistry of Solids*
- *Materials Science in Semiconductor Processing*
- *Materials Chemistry and Physics*
- *Journal of Material Chemistry C*
- *The Journal of Physical Chemistry C*
- *International Journal of Energy Research*
- *New Journal of Chemistry*
- *ACS omega*
- *Chemical Physics Letters*
- *Computational Biology and Chemistry*
- *Applied Surface Science*

Кандидат је био члан организационог одбора у следећим међународним конференцијама (**Прилог: Остала документа од значаја**)

- *Humboldt Conference on Noncovalent Interactions* (15-18. новембар 2007. године, Вршац)
- *Second Humboldt Conference on Noncovalent Interactions* (22-25. октобар 2009. година, Вршац)

#### 4.6. Утицај научних резултата

Цитираност објављених радова, листа радова у којима су радови цитирани, као и квалитет часописа у којима је кандидат објављивао своје резултате дати су у **Прилогу: Остала документа од значаја** и у **Табелама 1 и 2**.

## 5. ЕЛЕМЕНТИ ЗА КВАНТИТАТИВНУ ОЦЕНУ НАУЧНОГ ДОПРИНОСА КАНДИДАТА

Остварени резултати у периоду након одлуке Научног већа о предлогу за стицање претходног научног звања.

М-категорија	Бодови	Број радова	Укупно	Нормирано
M21a	10	4	40	29,322
M21	8	14	112	92,982
M22	5	3	15	13,125
M23	3	4	12	11,143
M32	1,5	2	3	3
M33	1	2	2	2

Поређење са миниманим квантитативним условима за избор у звање **НАУЧНИ САВЕТНИК** за природно-математичке и медицинске науке

	Неопходно	Остварено	Нормирано
<b>Укупно</b>	70	184	<b>151,572</b>
M10+M20+M31+M32+M33+M41+M42	50	184	151,572
M11+M12+M21+M22+M23	35	179	146,572

## 6. ЗАКЉУЧАК

На основу анализе остварених резултата може се закључити да је др Душан Средојевић веома успешан у свом досадашњем научно-истраживачком раду.

У периоду након одлуке Научног већа ИНН „Винча” о предлогу за стицање научног звања виши научни сарадник, резултате истраживања кандидат је објавио у оквиру **25** радова у међународним часописима, од тога **4** радова у међународним часописима изузетних вредности (**M21a**), **14** радова у врхунским међународним часописима (**M21**), **3** рада у истакнутим међународним часописима (**M22**), **4** радова у међународним часописима **M23** категорије. Остали резултати укључују два предавања по позиву **M32** и два саопштења на међународним конференцијама штампаним у целини **M33**. Његова научна компетентност од **151,572** бодова (нормираних) превазилази квантитативне критеријуме за избор у звање научни саветник, прописане Правилником о поступку, начину вредновања и квантитативном исказивању научноистраживачких резултата. Такође је потребно истаћи цитираност кандидата као битан показатељ квалитета његовог рада (**931** хетероцитат и Хиршов индекс **18**).

Др Душан Средојевић је ментор једне докторске дисертације, студенткиње Миљане Дукић истраживача приправника ИНН „Винча” и био је члан комисије за избор у звање научни сарадник др Слађане Доронтић, такође запошљене у ИНН „Винча”.

Руководи једним међународним пројектом, пројекат мултилатералне научне и технолошке сарадње у дунавском региону, са Чешком и Словачком. Након дугогодишњег боравка на Тексас А&М Универзитету у Катару, у оквиру постдокторских студија, још увек одржава сарадњу са неколико истраживачких тимова, што се може видети из објављених публикација. Рецезент је у многим научним часописима са високим импакт фактором.

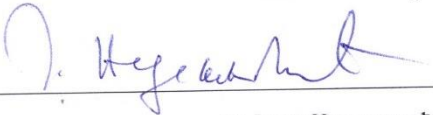
Одржао је предавање по позиву организатора међународне конференције **EMN Rome Meeting 2019** у Риму, Италија, 13-17. маја 2019. године, које је носило назив: “*Reduction of CO<sub>2</sub> into formic acid over the heterogeneous single-atom catalysts*”. Друго предавање је одржао по позиву организатора међународне конференције **ASC Research Conference: Chemistry and Chemical Engineering in MENA** у Дохи, Катар, одржане између 9. и 11. маја 2022. године, под називом: “Hydrogen evolution catalyzed by metal-decorated defected graphene and hexagonal boron-nitride”.

Комисија сматра да научно-истраживачки рад др Душана Средојевића представља значајан допринос у области теоријске и рачунарске хемије за моделовање различитих молекулских система у области катализе, наноматеријала и органских полимера са применом у хемији, биохемији, електроници и медицини. Имајући у виду оригиналност његових истраживања, као и значајан допринос научним сазнањима и методолошким приступима, као и квалитет публикованих резултата, а у складу са Правилником о поступку, начину вредновања и исказивању научноистраживачких резултата, чланови

Комисије сматрају да кандидат испуњава све услове за стицање научног звања НАУЧНИ  
САВЕТНИК.

У Београду, 09.10.2023. године

Чланови комисије:



Др Јован Недељковић,

Научни саветник Института за нуклеарне науке Винча,  
Институт од националног значаја за Републику Србију,  
председник Комисије



Др Весна Лазић,

Научни саветник Института за нуклеарне науке Винча,  
Институт од националног значаја за Републику Србију



Др Тамара Тодоровић,

Редовни професор Хемијског факултета у Београду,  
Универзитет у Београду