НАУЧНОМ ВЕЋУ ИНСТИТУТА ЗА ХЕМИЈУ, ТЕХНОЛОГИЈУ И МЕТАЛУРГИЈУ

Научно веће Универзитета у Београду, Института за хемију, технологију и металургију (ИХТМ), Института од националног значаја за Републику Србију, именовало нас је одлуком број 969 донетој на 63. седници одржаној 18.10.2023. године за чланове Комисије за писање реферата за избор др Весне Матејић у звање научни сарадник. На основу достављене документације о научноистраживачком раду кандидаткиње, у складу са Законом о науци и истраживању подносимо следећи

И З В Е Ш Т А Ј

А. Биографски подаци

Весна Матејић (девојачко Миловановић), рођена је 09.10.1992. године у Видању, општини Клина. Природно-математички факултет у Крагујевцу, одсек Хемија, уписала је 2011. године, а дипломирала 2015. године са просечном оценом 9,24. Током студија три пута је награђивана као студент генерације. Мастер академске студије уписала је 2015. године на Природно-математичком факултету у Крагујевцу, а завршила 2016. године са просечном оценом 9,89. Октобра 2016. године уписала је докторске академске студије на Природно-математичком факултету у Крагујевцу, смер Органска хемија, под менторством др Зорице Петровић, редовног професора Природно-математичког факултета у Крагујевцу и положила све испите предвиђене планом и програмом са просечном оценом 10,00. Тему докторске дисертације под насловом „Синтезе деривата одабраних *N*-хетероцикала засноване на принципима зелене хемије и испитивање антиоксидативног потенцијала добијених једињења“ пријавила је 13.11.2019. године, а одбранила 18.02.2022. године на Природно-математичком факултету Универзитета у Крагујевцу. У звање истраживач-приправник изабрана је 19.01.2017. године, а у звање истраживач-сарадник 15.01.2020. године. Од 03.04.2018. до 22.01.2020. године била је запослена на радном месту истраживача-приправника, а затим од 23.01.2020. до 29.09.2021. године на радном месту истраживача-сарадника у Институту за хемију на Природно-математичком факултету у Крагујевцу. Као истраживач ангажована је у настави, учествовала је у извођењу вежби из предмета Органска хемија 2 (2017/2018, 2019/2020 и 2020/2021) и Биоорганска хемија (2020/2021). Од октобра 2021. године запослена је на Агрономском факултету у Чачку Универзитета у Крагујевцу у звању асистент за ужу научну област Примењена хемија. На Агрономском факултету је ангажована у извођењу вежби из предмета Општа и неорганска хемија, Општа и неорганска хемија 1, Општа и неорганска хемија 2, Органска хемија, Биохемија, Биохемија 1, Биохемија 2, Квалитативна хемијска анализа и Квантитативна

хемијска анализа. Такође, била је учесница на билатералном пројекту са Словачком, одобреним од Министарства просвете, науке и технолошког развоја (2019-2020), „Synergy of experiment and theory: antioxidative action of phenolic compounds derivatives“ (No. 337-00-107/2019-09/10), руководиоци пројекта: Проф. др Зоран Марковић (State University of Novi Pazar), Lukeš (Slovenská technická univerzita v Bratislave). Учествовала је и на пројекту *In silico* дизајн потенцијалних антивирусних пиразолонских агенаса: S и Mpro протеини вируса SARS-CoV-2 као циљне мете – PyrAnt (No. XIII-I36), у оквиру Програма за научноистраживачке односно уметничке пројекте младих истраживача и уметника који се финансирају из средстава Центра за научноистраживачки рад САНУ и Универзитета у Крагујевцу (2020-2021), руководилац пројекта: Доц. др Владимир Петровић (Природно-математички факултет, Крагујевац). Добитница је ДААД-ове стипендије за истраживачки боравак на Универзитету у Минстеру, у Немачкој за период од 01.10.2019. до 29.02.2020. године.

Б. Библиографија

Током своје досадашње научноистраживачке каријере др Весна Матејић је објавила 27 библиографских јединица, од тога 11 радова у међународним часописима: 2 рада у врхунским међународним часописима (M21), 7 радова у истакнутим међународним часописима (M22), 1 рад у међународном часопису (M23), 1 рад у часопису међународног значаја верификованог посебном одлуком (M24), 8 саопштења са међународних скупова штампана у целини (M33), 3 саопштења са међународних скупова штампана у изводу (M34), 1 рад у националном часопису (M53) и 4 саопштења са скупова националног значаја штампаних у изводу (M64), са укупним M = 69,44 и укупним импакт фактором = 30,955. Према подацима научне базе SCOPUS, радови кандидаткиње (на дан 13.10.2023.) су цитирани укупно 43 пута без аутоцитата (Хиршов индекс, h-индекс = 4).

ORCID број: 0000-0002-4297-7042
Scopus ID: 57200805181

1. Радови објављени у научним часописима међународног значаја (M20)

M20 = 52,14 IF = 30,955

Радови у врхунским међународним часописима (M21) (M21 = 8; 2×8 = 16)

1.1. N. Lohmann, **V. Milovanović**, D.G. Piekarski, O. García Mancheño, Metal-free oxoammonium salt-mediated C(sp^3)–H oxidative Ugi-azide multicomponent reaction, *Org. Biomol. Chem.*, **2022**, 20, 2896–2908; https://doi.org/10.1039/D2OB00101B

ИФ: 3,890 (2021)

Област, позиција часописа/укупан број часописа: Chemistry, Organic (13/57),
Цитираност (без аутоцитата): 2
Број аутора: 4

1.2. V.P. Petrović, D. Simijonović, **V. Milovanović**, Z.D. Petrović, Acetophenone Mannich bases: study of ionic liquid catalysed synthesis and antioxidative potential of products, *Roy. Soc. Open Sci.*, **2018**, 5, 181232–181243; https://doi.org/10.1098/rsos.181232

ИФ: 2,693 (2018)
Област, позиција часописа/укупан број часописа: Multidisciplinary Sciences (20/69)
Цитираност (без аутоцитата): 6
Број аутора: 4

Радови у истакнутим међународним часописима (М22) (М22 = 5; 4×5 + 3,13 + 2×4,17 = 31,47)

1.3. J. Branković, **V.M. Milovanović**, Z.D. Petrović, D. Simijonović, V.P. Petrović, Pyrazolone-type compounds (part II): *in vitro* and *in silico* evaluation of antioxidant potential; structure-activity relationship, *RSC Adv.*, **2023**, *13*, 2884–2895. https://doi.org/10.1039/d2ra08280b

ИФ: 4,036 (2021)
Област, позиција часописа/укупан број часописа: Chemistry, Multidisciplinary (75/180)
Цитираност (без аутоцитата): 2
Број аутора: 5

1.4. J. Branković, N. Milivojević, **V. Milovanović**, D. Simijonović, Z.D. Petrović, Z. Marković, D.S. Šeklić, M.N. Živanović, M.D. Vukić, V.P. Petrović, Evaluation of antioxidant and cytotoxic properties of phenolic N-acylhydrazones: structure–activity relationship, *Roy. Soc. Open Sci.*, **2022**, 9, 211853. https://doi.org/10.1098/rsos.211853

ИФ петогодишњи: 3,854 (2021)
Област, позиција часописа/укупан број часописа: Multidisciplinary Sciences (30/74)
Цитираност (без аутоцитата): 2
Број аутора: 10 (нормирање: 5/(1+0,2×(10-7)) = 3,13)

1.5. J. Branković, **V.M. Milovanović**, D. Simijonović, S. Novaković, Z.D. Petrović, S.S. Trifunović, G.A. Bogdanović, V.P. Petrović, Pyrazolone-type compounds: synthesis and in silico assessment of antiviral potential against key viral proteins of SARS-CoV-2†, *RSC Adv.*, **2022**, 12, 16054–16070. https://doi.org/10.1039/d2ra02542f

ИФ: 4,036 (2021)
Област, позиција часописа/укупан број часописа: Chemistry, Multidisciplinary (75/180)
Цитираност (без аутоцитата): 1
Број аутора: 8 (нормирање: 5/(1+0,2×(8-7)) = 4,17)

1.6. **V. Milovanović**, Z.D. Petrović, S. Novaković, G.A. Bogdanović, D. Simijonović, M. Mladenović, J. Branković, V.P. Petrović, Pyrazole derivatives of medically relevant phenolic acids: insight into antioxidative and anti-LOX activity, *Med. Chem.*, **2021**, 17, 807–819. https://doi.org/10.2174/1573406416666200602152643

ИФ: 2,764 (2019)
Област, позиција часописа/укупан број часописа: Chemistry, Medicinal (30/61),
Цитираност (без аутоцитата): 1
Број аутора: 8 (нормирање: 5/(1+0,2×(8-7)) = 4,17)

1.7. **V.M. Milovanović**, Z.D. Petrović, S. Novaković, G.A. Bogdanović, V.P. Petrović, D. Simijonović, Green synthesis of benzamide-dioxoisoindoline derivatives and assessment of their radical scavenging activity – Experimental and theoretical approach, *Tetrahedron*, **2020**, 76, 131456. https://doi.org/10.1016/j.tet.2020.131456

ИФ: 2,457 (2020)
Област, позиција часописа/укупан број часописа: Chemistry, Organic (27/57),
Цитираност (без аутоцитата): 4
Број аутора: 6

1.8. **V. Milovanović**, Z.D. Petrović, S. Novaković, G.A. Bogdanović, D. Simijonović, V.P. Petrović, Structural characterization of benzoyl-1*H*-pyrazole derivatives obtained in lemon juice medium: Experimental and theoretical approach, *J. Mol. Struct.*, **2019**, 1195, 85–94. https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2019.05.095

ИФ: 2,463 (2019)
Област, позиција часописа/укупан број часописа: Chemistry, Physical (92/159),
Цитираност (без аутоцитата): 7
Број аутора: 6

1.9. 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 Adv.*, **2018**, 8, 16663–16673. https://doi.org/10.1039/C8RA02702A

ИФ: 3,257 (2016)
Област, позиција часописа/укупан број часописа: Chemistry, Multidisciplinary (53/166)
Цитираност (без аутоцитата): 12
Број аутора: 5

Радови у међународним часописима (М23) (М23 = 3; 1×3 = 3)

1.10. 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* **2017**, 2, 11187–11194. https://doi.org/10.1002/slct.201701873

ИФ: 1,505 (2017)
Област, позиција часописа/укупан број часописа: Chemistry, Multidisciplinary (106/171)
Цитираност (без аутоцитата): 6
Број аутора: 6

Радови у часописима међународног значаја верификованих посебном одлуком (М24) (М24 = 2; 1×1,67 = 1,67)

1.11. **V.M. Milovanović**, Z.D. Petrović, V.P. Petrović, D. Simijonović, M. Mladenović, N. Tomašević, Lj.R. Čomić, I.D. Radojević, *In vitro* and *in silico* lipoxygenase inhibition studies and antimicrobial activity of pyrazolyl-phthalazine-diones, *Kragujevac Journal of Science*, **2021**, 43, 35–52. https://doi.org/10.5937/KgJSci2143035M

ИФ: /
Област, позиција часописа/укупан број часописа: /
Цитираност (без аутоцитата): /
Број аутора: 8 (нормирање: 2/(1+0,2×(8-7)) = 1,67)

2. Зборници међународних научних скупова (М30)

М(30) = 9,5

Саопштења са међународних скупова штампана у целини (М33) (М33 = 1; 8×1 = 8)

2.1. V. Kurćubić, S. Stajić, N. Miletić, M. Petković, I. Đurović, **V. Milovanović**, Natural antimicrobial agents: application in food preservation and food born disease control. Book of Proceedings of the 1st International Symposium on Biotechnology, 17–18 March, 2023, Čačak, Serbia, pp. 357–364. ISBN 978-86-87611-88-7 (https://doi.org/10.46793/SBT28.357K)

2.2. V. Pantelić, N. Miletić, **V. Milovanović**, I. Đurović, M. Petković, A. Lukyanov, V. Filipović, Energy usage and raspberry convective and microwave drying parameters, Book of Proceedings of the 1st International Symposium on Biotechnology, 17–18 March, 2023, Čačak, Serbia, pp. 451–456. ISBN 978-86-87611-88-7 (https://doi.org/10.46793/SBT28.451P)

2.3. V. Pantelić, N. Miletić, **V. Milovanović**, I. Đurović, M. Petković, The antioxidant potential of convective and microwave-dried raspberries, Book of Proceedings of the 1st International Symposium on Biotechnology, 17–18 March, 2023, Čačak, Serbia, 445–450. ISBN 978-86-87611-88-7 (https://doi.org/10.46793/SBT28.445P)

2.4. V. Milovanović, M. Petrović, V. Kurćubić, M. Petković, N. Miletić, I. Đurović, Comparison of cow's milk with plant-based milk alternatives: selected chemical and physical analysis, Book of Proceedings of the 1st International Symposium on Biotechnology, 17–18 March, 2023, Čačak, Serbia, pp. 517–522. ISBN 978-86-87611-88-7 (https://doi.org/10.46793/SBT28.517M)

2.5. J. Branković, V. Milovanović, Z.D. Petrović, V.P. Petrović, Gallic acid hydrazones: *in silico* inhibition of thioredoxin reductase, Book of proceedings of the 1st International Conference on Chemo and Bioinformatics, 26–27 October, 2021, Kragujevac, Serbia, pp. 320-323. ISBN 978-86-82172-01-7 (https://doi.org/10.46793/ICCBI21.320B)

2.6. J. Branković, **V. Milovanović**, V.P. Petrović, Cyclooxygenase-2 as in silico target of phenolic hydrazone-type derivatives, Book of proceedings of the 1st International Conference on Chemo and Bioinformatics, 26–27 October, 2021, Kragujevac, Serbia, pp. 320-323. ISBN 978-86-82172-01-7 (https://doi.org/10.46793/ICCBI21.324B)

2.7. D. Simijonović, Z.D. Petrović, I.D. Radojević, Lj.R. Čomić, V.P. Petrović, **V. Milovanović**, Antimicrobial activity of substituted pyrazoles, Proceedings of ISER 210th International Conference, 19–20 July, 2019, Florence, Italy, pp. 19–23. ISBN 978-93-88786-14-0 (https://www.worldresearchlibrary.org/up_proc/pdf/3053-156776201519-23.pdf)

2.8. **V.M. Milovanović**, Z.D. Petrović, D. Simijonović, V.P. Petrović, J. Branković, Antioxidant activity of chromeno-pyrimidine fused heterocycles obtained in green reaction, Proceedings of ISER 210th International Conference, 19–20 July, 2019, Florence, Italy, pp. 15–18. ISBN 978-93-88786-14-0 (https://www.worldresearchlibrary.org/up_proc/pdf/3053-156776193715-18.pdf)

Саопштења са међународних скупова штампана у изводу (M34) (M34 = 0,5; 3×0,5 = 1,5)

2.9. Z.D. Petrović, J. Branković, V.P. Petrović, M. Vukić, D. Simijonović, **V. Milovanović**, Inclusion complexes of β-cyclodextrin and selected phenolic acid derivatives, Book of Abstracts of the 26th Congress of SCTM with international participation, 20-23 September, 2023, Ohrid, R. Macedonia, p. 63. ISBN 978-9989-760-19-8 (https://congress.sctm.mk/event/1/attachments/1/555/26th%20Congress%20of%20SCTM_Book%20of%20abstrakts.pdf)

2.10. V.P. Petrović, **V. Milovanović**, D. Simijonović, Z.D. Petrović, Z. Marković, Experimental and theoretical study of structure and antioxidant activity of some *N'*-benzylidene-3,4,5-trihydroxybenzohydrazides, Book of abstracts of the 8th International Conference on Computational Bioengineering (ICCB2019), 4–6 September, 2019, Belgrade, Serbia, p. 86. ISBN 978-86-81037-75-1 (UK) (http://www.iccb2019.kg.ac.rs/index.php/proceedings)

2.11. **V. Milovanović**, Z.D. Petrović, D. Simijonović, V.P. Petrović, Green synthesis, structure and antioxidative activity of the highly functionalized tetrahydropyridines, Book of Abstracts of the International Meeting on Medicinal and Bio(in)organic Chemistry, 26–31 August, 2017, Vrnjačka Banja, Serbia, p. 24. (https://www.google.com/url?sa=i&rct=j&q=&esrc=s&source=web&cd=&ved=0CDcQw7AJahcKEwiIsry5q7eBAxUAAAAAHQAAAAAQAw&url=https%3A%2F%2Fonline.uni-graz.at%2Fkfu_online%2FwbFPCompsCallBacks.cbExecuteDownload%3FpDocStoreNr%3D4047383&psig=AOvVaw0w1UdJ83Jbhz5sfBWBco9j&ust=1695235755166465&opi=89978449)

3. Радови објављени у часописима националног значаја (M50)

M(50) = 1

Радови у националним часописима (M53) (M53 = 1,0; 1×1,0 = 1,0)

3.1. **В.М. Миловановић**, J. Бранковић, Пиразолски деривати: „зелена” синтеза и медицински значај, *Хемијски преглед*, **2021**, 62, 80–85.

4. Предавања по позиву на скуповима националног значаја (M60)

M(60) = 0,8

Саопштења са скупова националног значаја штампана у изводу (M64) (M64 = 0,2; 4×0,2 = 0,8)

4.1. S.B. Novaković, G.A. Bogdanović, Z.D. Petrović, D. Simijonović, **V.M. Milovanović**, J. Branković, V.P. Petrović, Crystal structures of two methoxybenzene-pyrazolone derivatives, Abstracts of the 27th Conference of the Serbian Crystallographic Society, 16–17 September, 2021, Kragujevac, Serbia, pp. 70–71. ISBN 978-86-6009-085-2, ISSN 0354-5741 (2021-Izvodi-radova-XXVII-Konferencija-SKD-Kragujevac.pdf)

4.2. J. Branković, **V.M. Milovanović**, D. Simijonović, V.P. Petrović, Pyrazolone derivatives: synthesis, antioxidant activity, and binding to S and Mpro proteins of SARS-CoV-2 inferred by molecular docking, Book of abstracts of the 57th Meeting of the Serbian Chemical Society, 18–19 June, 2021, Kragujevac, Serbia, pp. 79. ISBN-978-86-7132-077-1 (https://cer.ihtm.bg.ac.rs/bitstream/handle/123456789/5824/bitstream_24046.pdf?sequence=1&isAllowed=y)

4.3. **V. Milovanović**, D. Simijonović, Z.D. Petrović, V.P. Petrović, Mechanistic study of three-component Mannich reaction and characterization of the products, Book of Abstracts of the 55th Meeting of the Serbian Chemical Society, 8–9 June, 2018, Novi Sad, Serbia, p. 98. ISBN 978-86-7132-069-6 (https://www.shd.org.rs/55SHD/Knjiga_izvoda_radova.pdf)

4.4. D. Simijonović, V.P. Petrović, **V. Milovanović**, Z.D. Petrović, Diastereoselective one-pot synthesis of vanillin-piperidine derivatives and investigation of their atioxidative activity, Book of Abstracts of the 53rd Meeting of the Serbian Chemical Society, 10–11 June, 2016, Kragujevac, Serbia, p. 120. ISBN 978-86-7132-061-0 (https://www.shd.org.rs/53SHD/)

5. Одбрањена докторска дисертација (M70 = 6)

Весна М. Миловановић, Синтезе деривата одабраних *N*-хетероцикала засноване на принципима зелене хемије и испитивање антиоксидативног потенцијала добијених једињења. Докторска дисертација, Природно-математички факултет, Универзитет у Крагујевцу, фебруар 2022. (https://nardus.mpn.gov.rs/handle/123456789/20723)

Укупно: M = M21 + M22 + M23 + M24 + M33 + M34 + M53 + M64 + M70 = 69,44
Укупан ИФ: 30,955

3. АНАЛИЗА ОБЈАВЉЕНИХ РАДОВА

Весна Матејић се бави научно-истраживачким радом у области органске и биоорганске хемије. Предмет тих истраживања су синтезе различитих азотних

хетероцикличних једињења, фенолних и полифенолних једињења засноване на принципима зелене хемије, структурна карактеризација добијених производа, као и испитивање механизама тих реакција. У оквиру свог рада, бави се и испитивањем антиоксидативне и антиинфламаторне активности добијених једињења. Од октобра 2021. године Весна се бави и научно-истраживачким радом у области примењене хемије: сакупљање биљног материјала и припрема њихових екстраката, одређивање фитохемијског састава и антиоксидативни скрининг одабраног биљног материјала.

Рад 1.1. У овом раду, представљена је ефикасна оксидативна C(sp^3)–H Уги-азидна вишекомпонентна реакција цикличних бензилних амина са одговарајућим α-тетразоло једињењима уз примену благог оксиданта (ТЕМПО). Овај једноставан приступ омогућава директну функционализацију *N*-хетероцикала као нпр. тетрахидроизохинолина са разним изоцијанидима и NaN_3 као практичним извором азида. Реакција се одвија на собној температури и без примене киселина, што омогућава употребу осетљивих супстрата, док је полимеризација изоцијанида сведена на минимум како би се добили жељени хетероциклични производи (тетразоли) у значајним приносима (до 99%).

Рад 1.2. Трокомпонентна Манихова реакција између ацетофенона или 4-јодоацетофенон, супституисаних анилина и бензалдехида, катализована диетаноламонијум хлорацетатом, изведена је при благим условима. Манихове базе, међу којима је пет новосинтетисаних, добијене су у добром до одличном приносу. Антиоксидативни потенцијал синтетисаних Манихових база је процењен *in vitro* коришћењем 2,2-дифенил-1-пикрил-хидразил радикала (DPPH) и термодинамички применом метода функционала густине. Показало се да једињења са анизидинским фрагментом испољавају умерену антиоксидативну активност. Механизам органокатализоване Манихове реакције је детаљно испитан помоћу метода функционала густине. У овом раду је приказан први извештај о утицају ове врсте катализатора на формирање иминијум јона, као кључног интермедијера за целу реакцију.

Рад 1.3. Присуство структурног мотива пиразолона у многим лековима, као што је едаравон, подстакло је на испитивање антиоксидативног својства одабраних једињења. У овом раду представљен је опширан *in vitro* и *in silico* опис антиоксидативних својстава одабраних аналога пиразолона. Добијени *in vitro* резултати показују велику антирадикалну моћ пиразолонских деривата против DPPH радикала (IC_{50} вредности у опсегу 2,6–7,8 μM), где су најбољи резултати добијени за аналоге који садрже катехолску јединицу. Теорија функционала густине је коришћена за процену њиховог антиоксидативног капацитета са термодинамичког аспекта при чему је постигнута добра сагласност са *in vitro* резултатима. Имајући у виду добро позната антиоксидативна својства лека едаравона, резултати добијени у овом раду представљају драгоцене податке који се могу користити као основа за даља истраживања.

Рад 1.4. У овом раду синтетисано је пет серија фенолних *N*-ацилхидразона којима је испитана антиоксидативна активност, као и утицај на HCT-116 и MRC-5 ћелијске линије. Међу 40 испитаних аналога, њих 20 је испољило антиоксидативну активност против HCT-116 и MRC-5 ћелијске линије радикала. Додатно, помоћу теорије функционалне густине је извшена процена антиоксидативне моћи одабраних аналога са термодинамичког аспекта, као и избор пожељнијег пута уклањања слободних радикала. Испитивање цитотоксичности је показало повећану селективност низа аналога према ћелијама рака. Анализа структуре и активности открила је утицај типа и положаја функционалних група на обе ћелијске линије и селективност према ћелијама рака.

Рад 1.5. У овом раду синтетисани пиразолонски деривати су окарактерисани коришћењем спектроскопских метода и теоријских алата, а *in silico* је процењен њихов утицај на протеине SARS-CoV-2 одговорне за улазак у ћелију домаћина и процесе репродукције, односно, *spike* протеин (S), M^{pro} и PL_{pro}. Добијени *in silico* резултати указују на повољнији афинитет везивања пиразолона према M^{pro}, и PL_{pro} у односу на лекове лопинавир, ремдесивир, хлорокин и фавипиравир, док у случају S протеина само је лопинавир испољио већи афинитет везивања. Такође, истраживања су обављена на ACE2 и *spike* RBDACE2 комплексу. Добијени резултати за ове протеине указују да одабрана једињења могу испољити антивирусна својства тако што блокирају везивање за ћелију домаћина и ширење вируса. Поред тога, *in silico* ADME/T прорачуни предвиђају повољне карактеристике синтетисаних једињења, сличне лековима, оралну биорасположивост, као и добре фармакокинетичке параметре повезане са апсорпцијом, метаболизмом и токсичношћу. Добијени резултати указују на велики потенцијал синтетисаних пиразолона као значајних агенаса против SARS-CoV-2 и представљају драгоцену основу за даља *in vitro* испитивања.

Рад 1.6. Циљ овог истраживања била је синтеза пиразолских деривата медицински релевантних фенолних киселина. Дериватима пиразола је *in vitro* тестирана антиоксидативна активност (DPPH тест) и инхибиторна активност липоксигеназе (LOX). Механизам уклањања радикала је процењен коришћењем метода функционала густине и термодинамичког приступа, док је молекуларни докинг примењен за процену начина везивања унутар ензима. Дериват пиразола са катехолском јединицом је показао одличну антиоксидативну активност, док је једињење са *p*-OH групом везаном за бензенов прстен показало најбољу анти-LOX активност. Молекуларним докингом је потврђено да не постоји директна интеракција било ког лиганда са активним местом LOX-Ib, али се пиразолски деривати понашају као инхибитори који блокирају приближавање линолне киселине активном месту ензима.

Рад 1.7. У овом раду је добијена серија деривата бензамид-диоксоизоиндолина ултразвучним зрачењем у води као растварачу и без икаквог катализатора. Сва једињења су подвргнута експерименталном одређивању њиховог антиоксидативног потенцијала.

DPPH тест је показао да су новосинтетисана фенолна једињења одлични антиоксиданси. Поред тога, анализиран је вероватни пут уклањања радикала за реакције најактивнијих једињења и неких радикала који се могу наћи у живим ћелијама.

Рад 1.8. Нова „зелена” методологија за синтезу бензоил-1*H*-пиразолских деривата при благим реакционим условима у присуству свеже процеђеног лимуновог сока (pH ~ 2), као растварача и катализатора, представљена је у овом раду. У реакцијама бензоил хидразида са електрон-донорским групама на бензеновом прстену, деривати 1-бензоил-1*H*-пиразола су добијени за кратко време реакције, и са добрим до високим приносима. С друге стране, бензоил хидразиди са електрон-привлачним групама реаговали су спорије, дајући смешу деривата 1-бензоил-5-хидрокси-4,5-дихидро-1*H*-пиразола и бензоил-1*H*-пиразола. Сва синтетисана једињења су окарактерисана спектроскопским методама као што су IR, UV-Vis, ^{1}H и ^{13}C NMR спектроскопија, као и тачкама топљења. Добра сагласност између експерименталног и симулираног IR, UV-Vis, ^{1}H и ^{13}C NMR спектра је постигнута. Поред тога, представљена је и анализа кристалних структура и Хиршфелдових површина (4,5-дихидро-5-хидрокси-3,5-диметилпиразол-1-ил)(4-јодофенил)метанона.

Рад 1.9. Деривати пиразолил-фталазин-диона су синтетисани у *one-pot* вишекомпонентној реакцији ацетилацетона, 2,3-дихидрофталазин-1,4-диона и различитих алдехида у присуству јонске течности као катализатора, у умереним до добрим приносима. Сва синтетисана једињења су подвргнута процени њихове *in vitro* антиоксидативне активности коришћењем стабилног DPPH радикала. Показало се да једињење са катехолским фрагментом представља најактивнији антиоксиданс што су потврдили и резултати термодинамичке студије. Поред тога, добијени теоријски резултати указују на SPLET као преовлађујући механизам за уклањање радикала у поларним растварачима и HAT у растварачима са мањом поларношћу. С друге стране, добијене енталпије реакције за инактивацију слободних радикала указују на компетитивност између HAT и SPLET механизама, осим у случају ·OH радикала у поларном растварачу, где је HAT механизам фаворизован.

Рад 1.10. У овом раду диетаноламонијум хидрогенсулфат и гликолна киселина су коришћени за синтезу високо функционализованих тетрахидропиридина. Због једноставности реакционог поступка и регенерације катализатора, ови зелени протоколи се могу узети у обзир као атрактиван приступ за припрему тетрахидропиридина. Експериментална и теоријска процена антиоксидативне активности ових једињења је спроведена. Добијене вредности термодинамичких параметара су у сагласности са експерименталним резултатима и указују на то да синтетисани тетрахидропиридини заслужују значајну пажњу као моћни чистачи радикала.

Рад 1.11. Серија деривата пиразолил-фталазин-диона била је подвргнута процени њихове *in vitro* инхибиције липоксигеназе и антимикробне активности. Добијени резултати за

активности инхибиције липоксигеназе су показали да сва једињења показују добру до одличну активност. Молекуларним моделирањем је истражен могући механизам деловања и начин везивања једињења унутар активног места ензима. Резултати докинга су показали да активност испитиваних једињења зависи од способности функционалне групе да формира водоничну везу и од хидрофобних карактеристика у активном месту липоксигеназе. Поред тога, тестирана је и антибактеријска и антифунгална активност пиразолил-фталазин-диона. Испитана једињења су показала бољу антифунгалну него антибактеријску активност. Највећи антифунгални активност је била према *Aspergillus fumigatus* ATTC 204305 и *Trichoderma viridae* ATCC 13233.

4. ПЕТ НАЈЗНАЧАЈНИЈИХ НАУЧНИХ ОСТВАРЕЊА СА ОБРАЗЛОЖЕЊЕМ

Рад 1.1. N. Lohmann, **V. Milovanović**, D.G. Piekarski, O. García Mancheño, Metal-free oxoammonium salt-mediated C(sp^3)–H oxidative Ugi-azide multicomponent reaction, *Org. Biomol. Chem.*, **2022**, 20, 2896–2908; https://doi.org/10.1039/D2OB00101B

Овај рад је проистекао као резултат студијског истраживачког боравка кандидаткиње као ДААД стипендисте на Универзитету у Минстеру, у Немачкој за период од 01.10.2019. до 29.02.2020. године.

Рад 1.6. V. Milovanović, Z.D. Petrović, S. Novaković, G.A. Bogdanović, D. Simijonović, M. Mladenović, J. Branković, V.P. Petrović, Pyrazole derivatives of medically relevant phenolic acids: insight into antioxidative and anti-LOX activity, *Med. Chem.*, **2021**, 17, 807–819. https://doi.org/10.2174/1573406416666200602152643

Овај рад био је од изузетне важности, као трећи рад за израду докторске дисертације кандидаткиње на ком је кандидаткиња први аутор. Овим радом кандидаткиња је проширила своју област истраживања на испитивање инхибиторне активност липоксигеназе.

Рад 1.7. V.M. Milovanović, Z.D. Petrović, S. Novaković, G.A. Bogdanović, V.P. Petrović, D. Simijonović, Green synthesis of benzamide-dioxoisoindoline derivatives and assessment of their radical scavenging activity – Experimental and theoretical approach, *Tetrahedron*, **2020**, 76, 131456. https://doi.org/10.1016/j.tet.2020.131456

Ова публикација је такође била од изузетне важности за израду докторске дисертације кандидаткиње, као други рад на ком је кандидаткиња први аутор.

Рад 1.8. V. Milovanović, Z.D. Petrović, S. Novaković, G.A. Bogdanović, D. Simijonović, V.P. Petrović, Structural characterization of benzoyl-1*H*-pyrazole derivatives obtained in lemon juice

medium: Experimental and theoretical approach, *J. Mol. Struct.*, **2019**, 1195, 85–94. https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2019.05.095

Ово је први рад на ком је кандидаткиња први аутор са којим је пријављена тема докторске дисертације. Рад је цитиран 7 пута без аутоцитата (проверено у Scopus бази података дана 13.10.2023.).

Рад 1.9. 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 Adv.*, **2018**, 8, 16663–16673. https://doi.org/10.1039/C8RA02702A

Ово је уједно и најцитиранији рад кандидаткиње (цитиран је 12 пута без аутоцитата (проверено у Scopus бази података дана 13.10.2023.)). Приликом реализације истраживања везаних за овај рад кандидаткиња је остварила активну сарадњу са колегама запосленим на Институту за нуклеарне науке „Винча“.

5. КВАЛИТАТИВНА ОЦЕНА НАУЧНОГ ДОПРИНОСА

5.1. Показатељи успеха у научном раду

(*Награде и признања за научни рад додељене од стране релевантних научних институција и друштава; уводна предавања на научним конференцијама и друга предавања по позиву; чланства у одборима међународних научних конференција; чланства у одборима научних друштава; чланства у уређивачким одборима часописа, уређивање монографија, рецензије научних радова и пројеката*)

5.1.1. Награде и признања за научни рад додељене од стране релевантних институција и друштава

Нема.

5.1.2. Уводна предавања на научним конференцијама и друга предавања по позиву

Нема.

5.1.3. Чланства у одборима међународних научних конференција

Била је члан организационог одбора 1. Међународног Симпозијума о биотехнологији (28. Симпозијум о биотехнологији са међународним учешћем) (https://www.afc.kg.ac.rs/files/data/sb/zbornik/Proceedings_SoB2023.pdf).

Прилог 1. Потврда о чланству

5.1.4. Рецензије научних радова

Нема.

5.2. Ангажованост у развоју услова за научни рад, образовању и формирању научних кадрова

(*Допринос развоју науке у земљи; менторство при изради мастер, магистарских и докторских радова, руковођење специјалистичким радовима; педагошки рад; међународна сарадња; организација научних скупова*)

5.2.1. Допринос развоју науке у земљи

Др Весна Матејић се од 2017. године активно бави научноистраживачким радом у области органске и биоорганске хемије. Предмет тих истраживања су синтезе различитих азотних хетероцикличних једињења, фенолних и полифенолних једињења засноване на принципима зелене хемије, структурна карактеризација добијених производа, као и испитивање механизама тих реакција. У оквиру свог рада, бави се и испитивањем антиоксидативне и антиинфламаторне активности добијених једињења.

Постигнути научни резултати финансирани су од стране ресорног Министарства (у оквиру претходног пројекта под називом „Синтеза, моделовање, физичко-хемијске и биолошке особине органских једињења и одговарајућих комплекса метала“ Ев. бр. ОИ 172016, уговори бр. 451-03-68/2020-14/200378 и 451-03-9/2021-14/200122).

Тренутно је ангажована на истраживањима у области примењене хемије финансираним од стране ресорног Министарства (уговори бр. 451-03-68/2022-14/200088 и 451-03-47/2023-01/200088).

5.2.2. Менторство при изради мастер, магистарских и докторских радова

Нема.

5.2.3. Педагошки рад

Др Весна Матејић је учествовала у извођењу вежби у звању истраживач-приправник и истраживач-сарадник на Природно-математичком факултету у Крагујевцу из следећих предмета:

-Органска хемија 2 (2017/18, 2019/20 и 2020/21 школске године),
-Биоорганска хемија (2020/21 школска година).

Од октобра 2021. Др Весна Матејић учествује у извођењу вежби у звању асистент на Агрономском факултету у Чачку из следећих предмета:

-Општа и неорганска хемија (2021/22, 2022/23),
-Општа и неорганска хемија 1 (2021/22, 2022/23),
-Општа и неорганска хемија 2 (2021/22, 2022/23),
-Органска хемија (2021/22),
-Биохемија (2021/22, 2022/23),
-Биохемија 1 (2022/23),
-Биохемија 2 (2022/23),
-Квалитативна хемијска анализа (2022/23),
-Квантитативна хемијска анализа (2022/23)

Прилог 2. Докази за педагошки рад

5.2.4. Међународна сарадња

Нема.

5.2.5. Организација научних скупова

Била је члан организационог одбора 57. Саветовања Српског хемијског друштва (https://cer.ihtm.bg.ac.rs/bitstream/handle/123456789/5824/bitstream_24046.pdf?sequence=1&isAllowed=y) и 1. Међународног Симпозијума о биотехнологији (28. Симпозијум о биотехнологији са међународним учешћем) (https://www.afc.kg.ac.rs/files/data/sb/zbornik/Proceedings_SoB2023.pdf).

Прилог 3. Доказ организациони одбор

5.3. Организација научног рада:

(*Руковођење пројектима, потпројектима и задацима; технолошки пројекти, патенти, иновације и резултати примењени у пракси; руковођење научним и стручним друштвима; значајне активности у комисијама и телима министарства надлежног за послове науке и технолошког развоја и другим телима везаних за научну делатност; руковођење научним институцијама*)

Нема.

5.4. Квалитет научних резултата:

(*Утицајност; параметри квалитета часописа и позитивна цитираност кандидатових радова; ефективни број радова и број радова нормиран на основу броја коаутора; степен самосталности и степен учешћа у реализацији радова у научним центрима у земљи и иностранству; допринос кандидата реализацији коауторских радова; значај радова*)

5.4.1. Утицајност

Најбољи показатељ утицајности публикованих научних резултата кандидаткиње огледа се у њиховој цитираности. Према подацима научне базе SCOPUS, радови кандидаткиње (на дан 13.10.2023.) су цитирани укупно 43 пута без аутоцитата (Хиршов индекс, h-индекс = 4).

5.4.2. Параметри квалитета часописа и позитивна цитираност кандидатових радова

Током своје досадашње научноистраживачке каријере др Весна Матејић је објавила 27 библиографских јединица, од тога 11 радова у међународним часописима: 2 рада у врхунским међународним часописима (М21), 7 радова у истакнутим међународним часописима (М22), 1 рад у међународном часопису (М23), 1 рад у часопису међународног значаја верификованог посебном одлуком (М24), 8 саопштења са међународних скупова штампана у целини (М33), 3 саопштења са међународних скупова штампана у изводу (М34), 1 рад у националном часопису (М53) и 4 саопштења са скупова националног значаја штампаних у изводу (М64), са укупним **М = 69,44** и укупним импакт фактором = **30,955**. Рад М21 (1.1.) цитиран је 2 пута, М21 (1.2.) цитиран је 6 пута, М22 (1.3.) цитиран је 2 пута, М22 (1.4.) 2 пута, М22 (1.5.) 1 пут, М22 (1.6.) 1 пут, М22 (1.7.) 4 пута, М22 (1.8.) 7 пута, М22 (1.9.) 12 пута и М23 (1.10.) 6 пута (без аутоцитата). Према подацима научне базе SCOPUS, радови кандидаткиње (на дан 13.10.2023.) су цитирани укупно 43 пута без аутоцитата (Хиршов индекс, h-индекс = 4).

5.4.3. Ефективни број радова и број радова нормиран на основу броја коаутора

Свих 11 радова кандидаткиње припадају групи експерименталних радова у природноматематичким наукама. На основу критеријума наведених у Правилнику о стицању научних и истраживачких звања, извршено је нормирање радова према броју коаутора за радове М22 (1.4.), М22 (1.5.), М22 (1.6.) и М24 (1.11.). Радови са нормираним бројем бодова су јасно обележени у Библиографији радова и израчунате су нормиране вредности бодова.

5.4.4. Степен самосталности и степен учешћа у реализацији радова у научним центрима у земљи и иностранству

Др Весна Матејић је показала висок степен самосталности у научноистраживачком раду. У току свог истраживачког рада, кандидаткиња је показала самосталност како у извођењу експеримента, тако и при обради и анализи добијених резултата, дискусији резултата, као и припреми радова за публиковање. Кандидаткиња је први аутор на 4 рада, од којих су 3 рада у истакнутим међународним часописима (М22) и 1 у часопису међународног значаја верификованог посебном одлуком (М24).

5.4.5. Допринос кандидата реализацији коауторских радова

У реализацији свих објављених радова Весна Матејић је учествовала у планирању и извођењу експеримената, обради резултата, дискусији, као и писању радова. Кандидаткиња је први аутор на **4** рада (Библиографија радова, М22 (1.6.), М22 (1.7.), М22 (1.8.), М24 (1.11.)) док је други аутор на **3** рада (Библиографија радова, М21 (1.1.), М22 (1.3.), М22 (1.5.)). Кандидаткиња је у радовима у којима је била први аутор, учествовала у дефинисању концепта истраживања, припреми и извођењу експеримената, анализи и тумачењу резултата, писању рада и комуникацији са рецензентима. Остали радови су резултат рада мултидисциплинарних тимова, при чему је кандидаткиња дала значајан допринос.

5.4.6. Значај радова

О значају научних радова др Весне Матејић говоре параметри квалитета часописа у којима су објављени њени радови. Током своје каријере кандидаткиња је публиковала укупно 11 радова у часописима међународног значаја. Од тога 2 рада су објављена у врхунским међународним часописима (М21), 7 радова у истакнутим међународним часописима (М22), 1 рад у међународном часопису (М23) и 1 у часопису међународног значаја верификованог посебном одлуком (М24). Кандидаткиња има и 8 саопштења са међународних скупова штампана у целини (М33), 3 саопштења са међународних скупова штампана у изводу (М34), 1 рад у националном часопису (М53) и 4 саопштења са скупова националног значаја штампаних у изводу (М64). Укупно М износи **69,44** (са одбрањеном докторском дисертацијом). Сви радови су нормирани на број коаутора према *Правилнику о стицању научних и истраживачких звања*. О значају радова говори и цитираност кандидата. Радови кандидаткиње су до сада наведени 43 пута без аутоцитата (Хиршов индекс, h-индекс = 4).

6. ОЦЕНА ИСПУЊЕНОСТИ КВАНТИТАТИВНИХ УСЛОВА ЗА СТИЦАЊЕ НАУЧНОГ ЗВАЊА НАУЧНИ САРАДНИК:

Др Весна Матејић се први пут бира у звање научног сарадника. Приказ минималних захтева за стицање звања научни сарадник као и остварених поена кандидата по свим условима дати су у следећој табели.

Диференцијални услов за избор у звање научни сарадник	Потребно је да кандидат има најмање 16 поена, који треба да припадају следећим категоријама:		
		Неопходно	Остварено
Научни сарадник	Укупно	16	69,44
Обавезни (1)	M10+M20+M31+M32+M33+M41+M42	10	60,14
Обавезни (2)	M11+M12+M21+M22+M23	6	50,47

Из наведених података следи да др Весна Матејић испуњава све квантитативне услове за избор у звање научни сарадник.

7. ЗАКЉУЧЦИ И ПРЕПОРУКЕ КОМИСИЈЕ

На основу свега изложеног у овом извештају, Комисија закључује да је др Весна Матејић, др хемијских наука, асистент Универзитета у Крагујевцу – Агрономског факултета у Чачку, остварила запажене резултате у свом научноистраживачком и педагошком раду. Др Весна Матејић је одбранила докторску дисертацију из области органске хемије и дала допринос примени зелених метода у синтези различитих азотних хетероцикличних једињења. Такође, кандидаткиња је дала допринос у реализацији наставе на Природно-математичком факултету и Агрономском факултету Универзитета у Крагујевцу. Др Весна Матејић је публиковала укупно 11 радова у часописима међународног заначаја (M20). Кандидаткиња има и 8 саопштења са међународних скупова штампана у целини (M33), 3 саопштења са међународних скупова штампана у изводу (M34), 1 рад у националном часопису (M53) и 4 саопштења са скупова националног значаја штампаних у изводу (M64). Према Правилнику о стицању истраживачких и научних звања, за избор у научно звање научни сарадник, минимална вредност М коефицијента је 16, а кандидаткиња је остварила укупно **69,44** (са одбрањеном докторском дисертацијом). Научни радови на којима је кандидаткиња коаутор објављени су у утицајним часописима, при чему укупан импакт фактор износи **30,955**. Према подацима научне базе SCOPUS, радови кандидаткиње (на дан 13.10.2023.) су цитирани укупно 43 пута без аутоцитата (Хиршов

индекс, h-индекс = 4). На основу претходно изнетих чињеница, а у складу са Законом о науци и истраживању („Службени гласник РС”, бр. 49/2019), као и са Правилником о поступку и начину вредновања и квантитативном исказивању научноистраживачких резултата истраживача („Службени гласник РС”, бр. 159), Комисија закључује да кандидаткиња испуњава све квантитативне и квалитативне критеријуме за избор у звање научни сарадник. Стога, Комисија предлаже Научном већу Института за хемију, технологију и металургију, да прихвати овај Извештај и предлаже избор др Весне Матејић у звање научни сарадник.

У Београду и Крагујевцу,
30. 10. 2023. године

К О М И С И Ј А

1. _____
Др Ирена Новаковић – виши научни сарадник
председник комисије
Универзитет у Београду
Институт за хемију, технологију и металургију
Научна област: хемија

2. _____
Др Дејан Опсеница, научни саветник
члан комисије
Универзитет у Београду
Институт за хемију, технологију и металургију
Научна област: хемија

3. _____
Др Јелена Катанић Станковић, виши научни сарадник
члан комисије
Универзитет у Крагујевцу
Институт за информационе технологије Крагујевац
Научна област: хемија