

УНИВЕРЗИТЕТ У БЕОГРАДУ – ХЕМИЈСКИ ФАКУЛТЕТ НАСТАВНО-НАУЧНО ВЕЋЕ

Предмет: Извештај о оцени научне заснованости и оправданости предложене теме за израду докторске дисертације мастер хемичара Миљане Дукић, докторанда Универзитета у Београду – Хемијског факултета

На редовној седници Наставно-научног већа Универзитета у Београду – Хемијског факултета, одржаној 13.2.2025. године, изабрани смо за чланове Комисије за подношење Извештаја о оцени научне заснованости и оправданости предложене теме за израду докторске дисертације мастер хемичара Миљане Дукић, пријављене под насловом:

„Хибридни наноматеријали добијени површинском модификацијом ZnO, ZrO₂ и SiO₂ фенолним једињењима: Прорачуни засновани на теорији функционала густине, фотокаталитичка и антимикробна активност“

На основу поднете документације и увида у досадашњи рад кандидата Миљане Дукић, Комисија подноси Наставно-научном већу Хемијског факултета следећи

ИЗВЕШТАЈ

А. Биографски подаци о кандидату

Миљана Дукић рођена је 19. новембра 1996. године у Београду, Република Србија. Основну школу у Београду завршила је као носилац Вукове дипломе, а средњу школу са одличним успехом. Основне студије на студијском програму Хемија на Хемијском факултету Универзитета у Београду уписала је школске 2016/17. године, а дипломирала 2020. године при Катедри за органску хемију. Мастер академске студије на истом факултету завршила је 2021. године, стичући звање мастер хемичара. Докторске академске студије на студијском програму Хемија уписала је школске 2022/23. године при Катедри за општу и неорганску хемију и до сада је положила све испите предвиђене планом и програмом. Од 1. фебруара 2023. године запослена је у Институту за нуклеарне науке „Винча“ – Институту од националног значаја за Републику Србију, у звању истраживач-приправник. Такође је чланица центра „CONVERSE“ – Центра изврности за конверзију светлосне енергије. Кандидаткиња је ангажована на истраживачкој теми „Функционални наноматеријали и полимерни нанокомпозити“ у оквиру програма истраживања „Нови материјали и нанонауке“. Учесница је у пројектима билатералне и мултилатералне сарадње, као и домаћим пројектима који повезују науку и привреду. Коауторка је једног рада у истакнутом међународном часопису (M22) и пет саопштења на скуповима од националног значаја (M64). Током основних и мастер студија била је истакнута чланица студентске заједнице, обављајући функцију потпредседнице Студентског парламента, као и чланице Комисије за праћење

и унапређење квалитета наставе и Савета Хемијског факултета. Учествовала је и у популаризацији науке кроз волонтерски ангажман на манифестацијама „Ноћ музеја“ и „Фестивал науке“.

Б. Објављени научни радови и саопштења

Коауторка је једног рада у истакнутом међународном часопису (M22) и пет саопштења на скуповима од националног значаја (M64).

M22 – Рад у истакнутом међународном часопису

Dušan N. Sredojević, Miriama Malček Šimunková, Đorđe Trpkov, **Miljana Dukić**, Vesna Lazić, Michal Malček: Exploring novel interfacial charge transfer complexes between TiO₂ and flavonoids: Theoretical study, ChemPhysChem, 1439-4235 (2025), DOI: [10.1002/cphc.202500058](https://doi.org/10.1002/cphc.202500058)

M64 – Саопштење са скупа националног значаја штампано у изводу

Miljana Dukić, Valentina Nikšić, Dušan Sredojević, Vesna Lazić, Jovan M. Nedeljković. Visible-Light-Responsive ZnO-Based ICT Complexes with Catecholate- and Salicylate-type Ligands: Synthesis, Characterization, and Application in Enhanced Hydrogen Production. The 2nd Serbian Conference on Materials Application and Technology – SCOM, October 18-20, 2023, Belgrade, Serbia, Book of Abstracts, ISBN 978-86-904450-2-8, O-2, pp. 16.

Miljana Dukić, Valentina Nikšić, Dušan Sredojević, Vesna Lazić, Jovan M. Nedeljković. Synthesis and characterization of hybrid nanomaterials based on ZnO. 59th Meeting of the Serbian Chemical Society, June 1-2, 2023, Novi Sad, Serbia, Book of Abstracts, ISBN 978-86-7132-081-8, HTM-1, pp. 140.

Valentina Nikšić, **Miljana Dukić**, Andrea Pirković, Vesna Lazić, Jovan M. Nedeljković. Modification of TiO₂ nanoparticles with dihydroquercetin: characterization, cytotoxicity and antimicrobial ability. The 2nd Serbian Conference on Materials Application and Technology – SCOM, October 18-20, 2023, Belgrade, Serbia, Book of Abstracts, ISBN 978-86-904450-2-8, O-1, pp. 15.

Valentina Nikšić, **Miljana Dukić**, Andrea Pirković, Vesna Lazić. Toxicity of TiO₂ nanoparticles modified with dihydroquercetin. 59th Meeting of the Serbian Chemical Society, June 1-2, 2023, Novi Sad, Serbia, Book of Abstracts, ISBN 978-86-7132-081-8, HTM-7, pp. 146.

Katarina Isaković, Valentina Nikšić, **Miljana Dukić**, Vesna Lazić. Immobilization of enzyme peroxidase on functionalized magnetite nanoparticles. The 3rd Serbian Conference on Materials Application and Technology – SCOM, October 16-18, 2024, Belgrade, Serbia, Book of Abstracts, ISBN 978-86-904450-4-2, O-3, pp. 14.

В. Образложење теме

1. Научна област: Хемија

Ужа научна област: Општа и неорганска хемија

2. Предмет научног истраживања

Планиран предмет научног истраживања ове докторске дисертације је синтеза и карактеризација хибридних наноматеријала цинк-оксида, цирконијум-диоксида и силицијум-диоксида површински модификованих фенолним једињењима, као и испитивање њихових фотокаталитичких и антимикробних својстава. Истраживање ће обухватити оптимизацију процеса модификације оксида метала фенолним једињењима ради побољшања њихових оптичких својстава, као и свеобухватну карактеризацију добијених наноматеријала коришћењем савремених инструменталних метода. Фотокаталитичка активност модификованих наноматеријала активираних видљивом светлошћу испитаће се у реакцији фотоелектролизе воде, чиме ће се утврдити њихов потенцијал за производњу водоника као чистог извора енергије. Поред тога, истраживање ће обухватити испитивање антимикробне активности синтетисаних наноматеријала према одабраним патогеним микроорганизмима – Грам-негативној бактерији *Escherichia coli*, Грам-позитивној бактерији *Staphylococcus aureus* и гљивици *Candida albicans* – ради испитивања могуће примене у третману отпадних вода. У оквиру докторске дисертације планирано је спровођење прорачуна заснованих на теорији функционала густине (eng. *density functional theory* – DFT) на одабраним моделима хибридних наноматеријала. Добијени теоријски подаци биће корелисани са експерименталним резултатима у циљу бољег разумевања структуре и својстава проучаваних наноматеријала. Очекује се да ће добијени резултати допринети развоју функционалних наноматеријала са унапређеним својствима који могу имати значајну улогу у областима заштите животне средине и одрживе енергетике.

3. Циљ научног истраживања

Предлог ове докторске дисертације обухвата синтезу и карактеризацију нових органско-неорганских хибридних наноматеријала кроз функционализацију површина наночестица ZnO , ZrO_2 и SiO_2 фенолним лигандима, као и испитивање фотокаталитичке и антимикробне активности ради потенцијалне примене у области заштите животне средине и обновљивих извора енергије. Синтеза наноматеријала биће спроведена путем контролисане површинске модификације комерцијалних наночестица оксида метала, при чему ће се користити различити фенолни деривати као органски модулатори. Циљ је да се оптимизацијом услова синтезе добију стабилни наноматеријали са жељеним површинским и структурним својствима. Добијени узорци биће детаљно окарактерисани применом савремених физичко-хемијских метода,

укључујући инфрацрвену и UV-Vis спектроскопију, рендгенску структурну анализу, термичку анализу и микроскопске технике, како би се утврдило у којој се мери разликују структуре и својства модификованих и немодификованих оксида метала. Поред синтезе и карактеризације наноматеријала, планирана је примена DFT прорачуна са двоструким циљем: прелиминарна процена интеракција између фенолних лиганада и површине одабраних кластерних модела оксида метала, као и додатна интерпретација добијених експерименталних резултата. На крају истраживања биће испитана фотокаталитичка и антимикуробна активност синтетисаних хибридних наноматеријала. Циљ је развој материјала са побољшаним својствима у односу на немодификоване оксиде метала; у контексту фотокатализе то подразумева активност под утицајем видљиве светлости, док се у оквиру антимикуробне примене очекује ефикаснија елиминација патогених микроорганизама.

4. Методе истраживања

У оквиру експерименталног дела истраживања планирана је синтеза наноматеријала на бази ZnO, ZrO₂ и SiO₂, као и њихова даља модификација органским молекулима у циљу добијања хибридних наноконпозита. ZnO биће добијен методом преципитације, при чему ће се користити цинк-нитрат и уреа као полазни реагенси, ZrO₂ хидротермалном методом из цирконил-нитрат хидрата и воденог раствора натријум-хидроксида, а SiO₂ биће коришћен у комерцијално доступном облику. Синтеза хибридних наноконпозита одвијаће се у воденој средини, применом различитих молских односа оксида и одабраних фенолних лиганада, у контролисаним временским условима. Добити материјали биће испрани ради уклањања неvezаних лиганада, затим сушени и окарактерисани применом различитих физичко-хемијских метода. Кристална структура и фазни састав добијених материјала биће анализирани рендгенском дифракцијом (XRD). Оптичка својства испитиваће се методом инфрацрвене спектроскопије са Фуријеовом трансформацијом (FTIR) и UV-Vis спектроскопијом. Морфолошке карактеристике и унутрашња структура наноматеријала биће проучаване трансмисионом електронском микроскопијом у комбинацији са енергетски дисперзионом спектроскопијом (TEM-EDS), док ће се специфична површина одређивати BET методом (*Brunauer-Emmett-Teller*). Поред експерименталне карактеризације, биће спроведени DFT и временски зависни прорачуни TD-DFT (eng. *time dependent DFT*) на моделима кластера уз примену софтверског пакета Gaussian 09. Антимикуробна активност добијених хибридних наноматеријала биће испитана на три патогена микроорганизама: *Escherichia coli* (Грам-негативна бактерија), *Staphylococcus aureus* (Грам-позитивна бактерија) и *Candida albicans* (гљивица). Тестирање ће се спровести контактном методом у физиолошком раствору и пратиће се редукција броја микроорганизама у функцији концентрације материјала и времена контакта. Каталитичка активност синтетисаних наноматеријала биће испитана у процесу

фотоэлектролизе воде при симулираном сунчевом зрачењу уз употребу живине лампе. Еволуција водоника ће се пратити методом гасне хроматографије (GC).

5. Актуелност проблематике у свету

Савремена наука се све интензивније суочава са изазовима који проистичу из потребе за одрживим енергетским решењима, ефикаснијом заштитом животне средине и борбом против растуће отпорности микроорганизама на антибиотике. У контексту конверзије соларне енергије, примена највише проучаваних полупроводника попут TiO_2 и ZnO ограничена је услед великог енергетског процепа, што их чини активним само у UV делу сунчевог спектра, који чини мање од 5% укупне соларне енергије. Ово значајно смањује њихову ефикасност у фотокаталитичким процесима и конверзији светлосне енергије¹. Као иновативно решење, све више се испитују комплекси са преносом наелектрисања (eng. *interfacial charge transfer* – ICT) – хибридни системи који настају хемијским везивањем органских лиганада за површину неорганских полупроводника или изолатора, најчешће оксида метала [2]. Формирањем ових комплекса долази до појаве интерфацијалних прелаза са преносом наелектрисања (eng. *interfacial charge transfer transitions*, ICTTs), који омогућавају апсорпцију фотона ниже енергије у поређењу са изворним материјалом, чиме се проширује спектар њихове оптичке активности ка видљивој области електромагнетног зрачења [3]. Како се свет тренутно суочава са енергетском кризом, ово својство је од кључног значаја за унапређење ефикасности конверзије светлосне енергије, посебно у процесима производње водоника као еколошки прихватљивог извора енергије [4]. Поред енергетских изазова, савремено друштво се суочава и са растућим проблемом загађења вода стабилним органским загађивачима, попут пестицида, фармацеутика и синтетичких боја. Ове супстанце су хемијски отпорне и тешко разградиве класичним методама пречишћавања, чиме представљају дугорочну претњу по здравље људи и животну средину [5]. ICT комплекси су се показали као ефикасни у фотокаталитичкој разградњи загађивача путем генерисања реактивних кисеоничних врста (eng. *reactive oxygen species*, ROS) које доводе до њихове деградације на мање молекуле [6]. Уз то, глобална здравствена криза повезана са све већом отпорношћу микроорганизама на антибиотике, због њихове прекомерне и нерегулисане употребе, захтева нове приступе у борби против бактеријских инфекција. Механизми антимикробне активности наноматеријала разликују се у односу на механизме дејства конвенционалних антимикробних лекова што може представљати потенцијално решење за превазилажење антимикробне резистенције [7]. Истраживања показују да се антимикробна својства металних оксида могу значајно унапредити њиховом површинском функционализацијом органским молекулима или наночестицама сребра [8, 9]. Због свега наведеног, од значаја је разумевање структуре, својстава и механизма активности ових хибридних наноматеријала како би се омогућио њихов сврсисходан развој и примена у енергетски и еколошки релевантним областима.

- [1] R. B. P. Marcelino and C. C. Amorim, 'Towards visible-light photocatalysis for environmental applications: band-gap engineering versus photons absorption—a review', *Environ. Sci. Pollut. R.*, 26 (2019) 4155. <https://doi.org/10.1007/s11356-018-3117-5>
- [2] S. Higashimoto, T. Nishi, M. Yasukawa, M. Azuma, Y. Sakata, and H. Kobayashi, 'Photocatalysis of titanium dioxide modified by catechol-type interfacial surface complexes (ISC) with different substituted groups', *J. Catal.*, 329 (2015) 286. <https://doi.org/10.1016/j.jcat.2015.05.010>
- [3] J. Fujisawa, 'Interfacial Charge-Transfer Transitions for Direct Charge-Separation Photovoltaics', *Energies (Basel)*, 13 (2020) 10. <https://doi.org/10.3390/en13102521>
- [4] S. Cao, L. Piao, and X. Chen, 'Emerging Photocatalysts for Hydrogen Evolution', *Trends Chem.*, 2 (2020) 57. <https://doi.org/10.1016/j.trechm.2019.06.009>
- [5] S. Khan, M. Naushad, M. Govarthanan, J. Iqbal, and S.M. Alfadul, 'Emerging contaminants of high concern for the environment: Current trends and future research', *Environ. Res.*, 207 (2022) 112609. <https://doi.org/10.1016/j.envres.2021.112609>
- [6] S. Wu, H. Hu, Y. Lin, J. Zhang, and Y. H. Hu, 'Visible light photocatalytic degradation of tetracycline over TiO₂', *Chem. Eng. J.*, 382 (2020) 122842. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2019.122842>
- [7] J. M. V Makabenta, A. Nabawy, C.-H. Li, S. Schmidt-Malan, R. Patel, and V. M. Rotello, 'Nanomaterial-based therapeutics for antibiotic-resistant bacterial infections', *Nat. Rev. Microbiol.*, 19 (2021) 23. <https://doi.org/10.1038/s41579-020-0420-1>
- [8] R. Fouladi-Fard, R. Aali, S. Mohammadi-Aghdam, and S. Mortazavi-derazkola, 'The surface modification of spherical ZnO with Ag nanoparticles: A novel agent, biogenic synthesis, catalytic and antibacterial activities', *Arabian J. Chem.*, 15 (2022) 103658. <https://doi.org/10.1016/j.arabjc.2021.103658>
- [9] F. H. Haghighi, M. Mercurio, S. Cerra, T. A. Salamone, R. Bianymotlagh, C. Palocci, V. R. Spica, and I. Fratoddi, 'Surface modification of TiO₂ nanoparticles with organic molecules and their biological applications', *J. Mater. Chem. B*, 11 (2023) 2334. <https://doi.org/10.1039/D2TB02576K>

6. Очекивани резултати

У оквиру предложеног истраживања очекује се добијање нових хибридних наноматеријала површинском модификацијом оксида цинка, цирконијума и силицијума различитим фенолним лигандима. Оптимизацијом синтезе и применом савремених метода карактеризације биће успостављена веза између структурних, морфолошких и оптичких својстава добијених материјала и услова њихове припреме. Примена DFT и TD-DFT прорачуна на кластерским моделима омогућиће боље разумевање интеракција између неорганског и органског дела хбрида, као и интерпретацију електронских и оптичких карактеристика материјала. Очекује се да ће модификовани наноматеријали показати бољу фотокаталитичку активност под утицајем видљиве светлости у поређењу са немодификованим оксидима, што ће бити потврђено испитивањем издвајања водоника у реакцији фотоелектролизе воде. Поред тога, испитивање антимикробне активности указаће на потенцијал ових наноматеријала за примену у третману отпадних вода, с обзиром на очекивану ефикаснију елиминацију патогених микроорганизама. Добијени резултати допринеће развоју нове класе функционалних наноматеријала са унапређеним својствима применљивих у областима одрживе енергетике, заштите животне средине и јавног здравља.

Г. Закључак

Предложена тема докторске дисертације је научно утемељена и актуелна у светском истраживачком контексту, а резултати би представљали научни допринос у области напредних хибридних органско-неорганских наноматеријала. У складу са Законом о високом образовању и Статутом Универзитета у Београду – Хемијског факултета, а имајући у виду наведено, сматрамо да кандидаткиња испуњава све потребне услове за одобравање израде докторске дисертације, те Комисија предлаже Наставно-научном већу Универзитета у Београду – Хемијског факултета да кандидаткињи Миљани Дукић, мастер хемичару, одобри израду докторске дисертације под измењеним насловом: **„Синтеза, карактеризација, фотокаталитичка и антимикробна активност површински модификованих наночестица ZnO, ZrO₂ и SiO₂“.**

Комисија за менторе предлаже др Милицу Миленковић, ванредног професора Универзитета у Београду – Хемијског факултета и др Душана Средојевића, научног саветника Института за нуклеарне науке „Винча“. Спискови радова предложених ментора који их квалификују за вођење докторске дисертације дати су у Прилогу 1 и 2 овог извештаја.

Београд, 23.4.2025.

ЧЛАНОВИ КОМИСИЈЕ

др Милица Миленковић, ванредни професор
Универзитета у Београду – Хемијског факултета

др Душан Средојевић, научни саветник
Института за нуклеарне науке „Винча“

др Весна Лазић, научни саветник
Института за нуклеарне науке „Винча“

др Јелена Пољаревић, доцент
Универзитет у Београду – Хемијски факултет

др Далибор Станковић, ванредни професор
Универзитет у Београду – Хемијски факултет

Прилог 1: Изабрани радови предложеног ментора др Милице Миленковић

Списак радова предложеног ментора објављених у научним часописима са SCI листе који квалификују ментора за вођење докторске дисертације.

Име и презиме ментора: др Милица Миленковић

Звање: Ванредни професор

Изабрани радови:

1. A. I. Uraev, **M. R. Milenković**, V. G. Vlasenko, K. A. Lyssenko, O. P. Demidov, A. A. Shiryayeva, M. P. Bubnov, P. A. Knyazev, D. A. Garnovskii, A. S. Burlov, A. A. Zubenko, Synthesis, structure, physico-chemical properties and biological activity of copper(II) ketoiminate complexes derived from N-naphthyl- and N-quinolyl- β -aminovinyl ketones, *Inorg. Chim. Acta* 579 (2025) 122560.
<https://doi.org/10.1016/j.ica.2025.122560>
2. J. Korać Jačić, M. Dimitrijević, D. Bajuk-Bogdanović, D. Stanković, S. Savić, I. Spasojević, **M. R. Milenković**, The formation of Fe³⁺-doxycycline complex is pH dependent: implications to doxycycline bioavailability, *J. Biol. Inorg. Chem.*, 28 (2023) 679.
<https://doi.org/10.1007/s00775-023-02018-w>
3. J. Korać Jačić, D. Bajuk-Bogdanović, S. Savić, B. Božić Cvijan, I. Spasojević, **M. R. Milenković**, Coordination of hydralazine with Cu²⁺ at acidic pH promotes its oxidative degradation at neutral pH, *J. Inorg. Biochem.*, 243 (2023) 112181.
<https://doi.org/10.1016/j.jinorgbio.2023.112181>
4. J. Korać Jačić, **M. R. Milenković**, D. Bajuk-Bogdanović, D. Stanković, M. Dimitrijević, I. Spasojević, The impact of ferric iron and pH on photo-degradation of tetracycline in water, *J. Photochem. Photobiol. A.*, 433 (2022) 114155.
<https://doi.org/10.1016/j.jphotochem.2022.114155>
5. M. Šuljagić, **M. Milenković**, V. Uskoković, M. Mirković, B. Vrbica, V. Pavlović, V. Živković-Radovanović, D. Stanković, L. Andjelković, Silver distribution and binding mode as key determinants of the antimicrobial performance of iron oxide/silver nanocomposites, *Mater. Today Commun.*, 32 (2022) 104157.
<https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2022.104157>

Прилог 2: Изабрани радови предложеног ментора др Душана Средојевића

Списак радова предложеног ментора објављених у научним часописима са SCI листе који квалификују ментора за вођење докторске дисертације.

Име и презиме ментора: др Душан Средојевић

Звање: Научни саветник

Изабрани радови:

1. **D. N. Sredojević**, I. Vukoje, Đ. Trpkov, E. N. Brothers, A DFT study of CO₂ electroreduction catalyzed by hexagonal boron-nitride nanosheets with vacancy defects, *PhysChemChemPhys*. 26 (2024) 8356.
<https://doi.org/10.1039/D3CP06186H>
2. M. Shahriari-Khalaji, F. Zabihi, A. Bahi, **D. Sredojević**, J. M. Nedeljković, D. K. Macharia, M. Ciprian, S. Yang, F. Kob, Photon-driven bactericidal performance of surface-modified TiO₂ nanofibers, *J. Mater. Chem. C*, 11 (2023) 5796.
<https://doi.org/10.1039/D3TC00473B>
3. Đ. Trpkov, **D. Sredojević**, J. Pajović, D. Tošić, D. K. Božanić, V. Đoković, Hybrid nanostructures of nitrogen-doped carbon dots and aromatic amino acids: Synthesis, interactions at interfaces and optical properties, *Colloids Surf., B*, 238 (2024) 113878.
<https://doi.org/10.1016/j.colsurfb.2024.113878>
4. V. Nikšić, M. M. Šimunkova, Z. Dyrčikova, D. Dvoranova, V. Brezova, **D. Sredojević**, J. M. Nedeljković, V. Lazić, Photoinduced reactive species in interfacial charge transfer complex between TiO₂ and taxifolin: DFT and EPR study, *Opt. Mater.* 152 (2024) 115454.
<https://doi.org/10.1016/j.optmat.2024.115454>
5. S. Dorontić, A. Bonasera, M. Scopelliti, O. Marković, T. Verbić, **D. Sredojević**, G. Ciasca, R. Di Santo, J. L. Mead, M. Budimir, D. Bajuk-Bogdanović, M. Mojsin, J. Pejić, M. Stevanović, S. Jovanović, High-performing structural optimization of graphene quantum dots as glyphosate herbicide photoluminescent probes: real case studies and mechanism insights, *J. Environ. Chem. Eng.* 12 (2024) 113193. <https://doi.org/10.1016/j.jece.2024.113193>