

УНИВЕРЗИТЕТ У БЕОГРАДУ – ХЕМИЈСКИ ФАКУЛТЕТ

НАСТАВНО-НАУЧНОМ ВЕЋУ

ПРИМЉЕНО:	27-02-2025
Одс. јед.	Број
	Прилог

112/3

На редовној седници Наставно-научног већа Универзитета у Београду – Хемијског факултета одржаној 13. фебруара 2025. године покренут је поступак за избор Катарине А. Ђеранић, мастер физикохемичара, истраживача-приправника Иновационог центра Хемијског факултета у Београду, у звање истраживач-сарадник (одлука 112/2 од 13. фебруара 2025). На истој седници изабрани смо за чланове комисије за оцену резултата научног и стручног рада кандидата и оцену испуњености услова за избор кандидата у звање истраживач-сарадник.

На основу поднете документације и увида у научноистраживачки рад кандидаткиње, а у складу са члановима 78. и 85. Закона о науци и истраживањима („Сл. Гласник РС“, 49/19), Правилником о стицању истраживачких и научних звања („Сл. Гласник РС“, 159/2020-152) и чланом 46. Статута Универзитета у Београду – Хемијског факултета, подносимо Наставно-научном већу следећи

ИЗВЕШТАЈ

1. Биографски подаци о кандидату

Катарина (Александар) Ђеранић рођена је 6. децембра 1997. године у Београду. Завршила је Хемијско-прехрамбену технолошку школу у Београду, смер Техничар за заштиту животне средине. Факултет за физичку хемију Универзитета у Београду је уписала 2016. године. Основне академске студије је завршила 2021. године, одбраном завршног рада *Теоријска анализа кето-енолне таутомерије ацетона у гасовитом стању и у воденом раствору*, под менторством проф. др Милене Петковић, са просечном оценом 9,30. Мастер академске студије је уписала 2021. године и завршила 2022. године, одбраном завршног рада *Теоријска анализа својства димера бензен-пиридин*, под менторством проф. др Милене Петковић, са просечном оценом 10,00.

Докторске академске студије уписала је 2022. године на Факултету за физичку хемију Универзитета у Београду, ужа научна област Физичка хемија – квантна хемија. Положила је све испите предвиђене наставним планом, са просечном оценом 10,00. У јануару 2025. године пријавила је тему докторске дисертације под називом *Анализа интеракција јона метала са макроцикличним и π-системима методама квантне хемије*, под менторством проф. др Милене Петковић и доц. др Душана Маленова. Ова тема је прихваћена од стране Наставно-научног већа Универзитета у Београду – Факултета за физичку хемију (одлука бр. 45 од 16. јануара 2025. године), а потом и од стране Већа научних области природних наука Универзитета у Београду (одлука бр. 61206-259/2-25 од 30. јануара 2025. године).

Катарина Ђеранић је изабрана у истраживачко звање истраживач-приправник на Факултету за физичку хемију Универзитета у Београду 8. децембра 2022. године.

Запослена је на позицији истраживач-приправник на Иновационом центру Хемијског факултета у Београду од 1. марта 2023. године. Члан је пројектног тима „Empowering Chemistry Students to Discover Noncovalent Interactions via the Cambridge Structural Database – CSD4NCI Workshop“ (2024-2025) под руководством др Душана Маленова, који финансира Кембрички центар кристалографских података (CCDC) у оквиру иницијативе CCDC Engagement Grants. Такође, члан је пројектног тима „Machine Learning Investigation of Weak Interactions in Biological Systems“ (2024-2026) под руководством проф. др Снежане Зарић, у оквиру програма билатералне сарадње између Републике Србије и Народне Републике Кине.

Катарина Ђеранић је била члан организационог одбора Треће међународне конференције о нековалентним интеракцијама, која је одржана у Београду у јуну 2024. године. Члан је Клуба младих хемичара Србије од 2023. године. Говори, чита и пише енглески језик.

2. Научноистраживачки рад кандидата

Кандидаткиња Катарина Ђеранић се од почетка 2023. године бави научноистраживачким радом на Факултету за физичку хемију и Иновационом центру Хемијског факултета у Београду, у оквиру истраживања које финансира Министарство науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије. Катарина Ђеранић се у свом научноистраживачком раду бави испитивањем нековалентних интеракција методама квантне хемије.

У досадашњем раду кандидаткиња је проучавала катјон-π интеракције јона алкалних и земноалкалних метала, као и амонијум-јона са сендвич-једињењима бензена и циклопентадиенилног анјона. Фокус ових истраживања је утврђивање утицаја координације π-система прелазним металима на енергетске и геометријске параметре катјон-π интеракција. Досадашња истраживања показала су да сендвич-једињења могу бити значајно бољи рецептори за катјоне од органских ароматичних једињења.

Друга значајна област њеног истраживања је проучавање домаћин-гост интеракција. У оквиру досадашњих истраживања у овој области у којима је кандидаткиња учествовала, установљен је протокол за проналажење оптималног крунског етра (домаћин) за везивање јона метала (гост) коришћењем метода квантне хемије. Као резултат ових истраживања утврђен је оптимални крунски етар за везивање Mg^{2+} јона.

3. Објављени научни радови и саопштења

Катарина Ђеранић је први аутор једног рада објављеног у врхунском међународном часопису (M21) и једног рада објављеног у истакнутом међународном часопису (M22). Кандидаткиња је такође коаутор једног саопштења са међународног скупа штампаног у целини (M33), три саопштења са међународних скупова штампана у изводу (M34), као и пет саопштења са скупова националног значаја штампаних у изводу (M64).

Рад објављен у врхунском међународном часопису (М21)

- 1) Katarina Ćeranić, Branislav Milovanović, Milena Petković, *Density functional theory study of crown ether-magnesium complexes: from a solvated ion to an ion trap*. Phys. Chem. Chem. Phys. **2023**, 25 (47), 32656-32665.
<https://doi.org/10.1039/D3CP03991A>

IF(2021) = 3,945; 9/36 Physics, Atomic, Molecular & Chemical

Рад објављен у истакнутом међународном часопису (М22)

- 1) Katarina Ćeranić, Branislav Milovanović, Milena Petković, *Crown Ether-Magnesium Ion Complexes: A Reliable Theoretical Estimation of Host-Guest Interaction and Binding Energies in a Solvent*. ChemPlusChem, **2024**, e202400599.
<https://doi.org/10.1002/cplu.202400599>

IF(2022) = 3,4; 83/178 Chemistry, Multidisciplinary

Саопштење са међународног скупа штампано у целини (М33)

- 1) Dušan P. Malenov, Katarina A. Ćeranić, Dubravka Z. Vojislavljević-Vasilev, Snežana D. Zarić, *Modeling ion- π interactions of transition metal complexes*. 2nd International Conference on Chemo and Bioinformatics (ICCBIG 2023), Kragujevac, Serbia, September 2023. Book of Proceedings p. 621-624.

Саопштења са међународних скупова штампана у изводу (М34)

- 1) Katarina Ćeranić, Marijana Hercigonja, Branislav Milovanović, Milena Petković, *Designing Crown Ethers for Capturing Metal Ions*. 3rd International Conference on Noncovalent Interactions (ICNI-III), Belgrade, Serbia, June 2024. Book of Abstracts IL30
- 2) Katarina A. Ćeranić, Snežana D. Zarić, Dušan P. Malenov, *Very strong cation- π interactions of coordinated benzene in sandwich-compounds – a DFT study*. 3rd International Conference on Noncovalent Interactions (ICNI-III), Belgrade, Serbia, June 2024. Book of Abstracts FP12
- 3) Katarina A. Ćeranić, Snežana D. Zarić, Dušan P. Malenov, *Unravelling the changes in the geometries of sandwich compounds induced by cation- π interactions – a DFT study*. 4th European Symposium on Chemical Bonding (CBOND2024), Amsterdam, Netherlands, September 2024. Book of Abstract p. 75.

Саопштења са скупова националног значаја штампана у изводу (М64)

- 1) Dušan P. Malenov, Katarina A. Ćeranić, Snežana D. Zarić, *Interactions of ions with aromatic ligands in (half-)sandwich compounds: new types of π -systems for ion recognition*. 59. Savetovanje Srpskog hemijskog društva, Novi Sad, Srbija, jun 2023. Kratki izvodi radova str. 111.

- 2) **Katarina A. Ćeranić**, Dušan P. Malenov, Snežana D. Zarić, *Benzene coordination strengthens cation-π interactions: A DFT study*. 9th Conference of Young Chemists of Serbia. Novi Sad, Srbija, novembar 2023. Book of Abstracts p. 18.
- 3) **Katarina A. Ćeranić**, Snežana D. Zarić, **Dušan P. Malenov**, *The nature of ion-π interactions of (half-)sandwich compounds – a XEDA study*. 60. Savetovanje Srpskog hemijskog društva, Niš, Srbija, jun 2024. Kratki izvodi radova str. 31.
- 4) **Katarina A. Ćeranić**, Snežana D. Zarić, Dušan P. Malenov, *Energy decomposition analysis of cation-π interactions of sandwich compounds*, 10th Conference of Young Chemists of Serbia, Beograd, Srbija, oktobar 2024. Book of Abstracts p. 25.
- 5) **Katarina A. Ćeranić**, Branislav Ž. Milovanović, Milena M. Petković, *Designing a crown ether detector for Mg²⁺ ions*, 10th Conference of Young Chemists of Serbia, Beograd, Srbija, oktobar 2024. Book of Abstracts p. 107.

4. Квантитативна оцена резултата кандидата на основу коефицијента М

Категорија	Број	Вредност	Укупно (нормирано према броју аутора)
M21	1	8	8
M22	1	5	5
M33	1	1	1
M34	3	0,5	1,5
M64	5	0,2	1
Укупно			16,5

Укупна вредност коефицијента М кандидаткиње Катарине Ђеранић износи 16,5.

5. Закључак

На основу поднете документације и личног увида у досадашњи научноистраживачки рад, комисија закључује да је кандидаткиња Катарина Ђеранић, мастер физикохемичар, студент докторских студија на Универзитету у Београду – Факултету за физичку хемију и истраживач-приправник Иновационог центра Хемијског факултета у Београду, квалитетан млади истраживач и да се успешно бави научноистраживачким радом.

У свом досадашњем раду кандидаткиња се бавила испитивањем катјон-π интеракција измађу алкалних, земноалкалних катјона и амонијум-јона са сендвич-једињењима, као и домаћин-гост интеракција измађу Mg²⁺ јона и крунских етара, користећи методе квантне хемије. Кандидаткиња је коаутор два научна рада, од чега једног објављеног у врхунском међународном часопису, као и девет саопштења на међународним и домаћим научним скуповима. Укупна вредност коефицијента М кандидаткиње Катарине Ђеранић износи 16,5.

Кандидаткиња је од 2022. године студент докторских студија на Универзитету у Београду – Факултету за физичку хемију, где је положила све испите предвиђене наставним планом докторских студија. У јануару 2025. године пријавила је тему за израду

докторске дисертације под називом *Анализа интеракција јона метала са макроцикличним и π-системима методама квантне хемије*, која је потом прихваћена од стране Наставно-научног већа Факултета за физичку хемију, као и од стране Већа научних области природних наука Универзитета у Београду.

Комисија закључује да кандидаткиња испуњава све законом прописане услове за избор, те са задовољством предлаже Наставно-научном већу Универзитета у Београду – Хемијског факултета да усвоји овај извештај и изабере **Катарину Ђеранић** у истраживачко звање **истраживач-сарадник**.

У Београду, 27. фебруара 2025. године

Комисија

др Душан Маленов
доцент, виши научни сарадник
Универзитет у Београду – Хемијски факултет

др Снежана Зарић
редовни професор
Универзитет у Београду – Хемијски факултет

др Милена Петковић
редовни професор
Универзитет у Београду – Факултет за физичку хемију