

ИЗВЕШТАЈ О ОЦЕНИ ДОКТОРСКЕ ДИСЕРТАЦИЈЕ

ПОДАЦИ О КАНДИДАТУ

Презиме, име једног
родитеља и име
Датум и место рођења

Јовановић, Мирољуб, Душица
05.08.1989., Београд

Основне студије

Универзитет
Факултет
Студијски програм
Звање
Година уписа
Година завршетка
Просечна оцена

Универзитет у Београду
Факултет за физичку хемију
Физичка хемија
Дипломирани физикохемичар
2008
2016
7,43

УНИВЕРЗИТЕТ У НИШУ
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ У НИШУ

Примљено: 24.4.2026.

ОРГ. ЈЕД.	Број	Прилог	Вредност
01	819		

Магистер студије, магистарске студије

Универзитет
Факултет
Студијски програм
Звање
Година уписа
Година завршетка
Просечна оцена
Научна област
Наслов завршног рада

Универзитет у Београду
Факултет за физичку хемију
Физичка хемија
Магистер физикохемичар
2016
2017
9,25
Физичко-хемијске науке
Квантно-хемијско испитивање различитих модификација леда, кристалног
натријум-хлорида, кластера воде и кластера воде са натријум-хлоридом

Докторске студије

Универзитет
Факултет
Студијски програм
Година уписа
Остварен број ЕСПБ бодова
Просечна оцена

Универзитет у Нишу
Природно-математички факултет
Хемија
2017
150
10,00

НАСЛОВ ТЕМЕ ДОКТОРСКЕ ДИСЕРТАЦИЈЕ

Наслов теме докторске
дисертације
Наслов теме докторске
дисертације на енглеском
језику
Име и презиме ментора,
звање
Број и датум добијања
сагласности за тему
докторске дисертације

Предвиђање структура, енергетски пејзажи и испитивање својстава чистих и
допираних једињења на бази TiO_2 и хибридних органско-неорганских материјала
Structure prediction, energy landscapes and investigation of properties of pristine and
doped TiO_2 based compounds and hybrid organic-inorganic materials
др Александра Зарубица, редовни професор
102/1-01; 25.01.2023.

ПРЕГЛЕД ДОКТОРСКЕ ДИСЕРТАЦИЈЕ

Број страна
Број поглавља
Број слика (шема, графикона)
Број табела

378
14
67
173

**ПРИКАЗ НАУЧНИХ И СТРУЧНИХ РАДОВА КАНДИДАТА
који садрже резултате истраживања у оквиру докторске дисертације**

Р. бр.	Аутор-и, наслов, часопис, година, број волумена, странице	Категорија
1	<p>Dušica Jovanović, Johann Christian Schön, Dejan Zagorac, Aleksandra Zarubica, Branko Matović, and Jelena Zagorac, "Energy Landscape of Relaxation and Interaction of an Amino Acid, Glutamine (L), on Pristine and Au/Ag/Cu-Doped TiO₂ Surfaces", Nanomaterials, 2023, 13(19), pp. 2688. https://doi.org/10.3390/nano13192688</p> <p>Истраживање интеракција неорганских система са органским је изузетно важан правац за откривање нових лекова и терапијских метода. Ћелије тумора показују повећану потребу за аминокиселинама због брзе пролиферације, стога усмеравање на њихов метаболизам постаје потенцијална онколошка терапијска стратегија. TiO₂ показује антитуморна својства, а допирање побољшава биолошке интеракције. У овој студији испитивани су енергетски пејзажи глутамин на чистим и Au/Ag/Cu допираним TiO₂ (001 и 101) површинама. Оптимизоване су структуре и различите конфигурације молекула DFT методом са GGA-PBE функционалом у Quantum Espresso коду, пружајући увиде у механизме интеракција и потенцијалне биолошке ефекте.</p>	M21
2	<p>Dusica Jovanovic, Dejan Zagorac, Branko Matovic, Aleksandra Zarubica, and Jelena Zagorac. "Anion substitution and influence of sulfur on the crystal structures, phase transitions, and electronic properties of mixed TiO₂/TiS₂ compounds.", Structural Science, 2021, 77(5), pp. 833-847. https://doi.org/10.1107/S2052520621008891</p> <p>У овом истраживању су испитивани чврсти раствори кристалних структура TiO_{1-x}S_x (x = 0, 0,25, 0,5, 0,75 и 1) на <i>ab initio</i> нивоу. За сваки састав, кристалне структуре анатаза, рутила и CdI₂ типа структуре вршени су прорачуни на LDA-PZ и GGA-PBE теоријском нивоу. Приказани су нови фазни прелази и предвиђене структуре, а поред неколико метастабилних структура, у TiOS саставу је пронађен веома интересантан фазни прелаз у зависности од притиска, док су електронска својства проучавана кроз зависност полупроводничких својстава од концентрације допанта. Детаљна студија структурно-својственог односа ће евентуално имати бројне индустријске и технолошке примене.</p>	M21
3	<p>Dušica Jovanović, Jelena Zagorac, Branko Matović, and Aleksandra Zarubica, "AX₂-TYPE OF COMPOUNDS AND AN OVERVIEW OF THEORETICALLY INVESTIGATED TiO₂.", Advanced Technologies, 2020, 9(2), pp. 79-87.</p> <p>Материјали једињења типа AX₂ поседују особине које налазе примену у различитим областима науке и индустрије. TiO₂ (опште формуле AX₂) је материјал са полупроводничким особинама широког опсега вредности директног енергетског процепа, често истраживан због фотокаталитичких особина и различитих примена. У овом раду је представљен преглед теоријски испитиваних модификација TiO₂ и актуелних проблема на које се може наићи приликом извођења рачуна (различите вредности величине енергетског процепа у зависности од примењене методе и функционала; разлика у стабилности модификација испитиваних на <i>ab initio</i> нивоу и експериментално; карактер хемијских веза и прелази на одређеним температурама и притисцима...), као и превазићи додатком одређених корекција.</p>	M24
4	<p>Dušica Jovanović, Dejan Zagorac, Aleksandra Zarubica, Matej Fonović, and Jelena B. Zagorac, "DFT Study of Crystalline TiO₂ Phase Transitions Applicable in Extreme Environments." Journal of Innovative Materials in Extreme Conditions, 2023, 4(1), pp. 30-37.</p> <p>Кристални TiO₂ има широку примену као фотокаталитички материјал. У овој студији теоријски су испитиване структуре и релативне енергије једанаест различитих модификација TiO₂ у булк облику. Израчунавања су спроведена методом DFT са LDA-PZ функционалом у CRYSTAL17 коду. Израчунати су структурни параметри, криве енергија у функцији запремине и електронски енергетски процепи. Циљ студије је био да се добије увид у електронску структуру различитих модификација чистог TiO₂ и фазне прелазе, нарочито при екстремним притисцима и температурама. Резултати могу допринети будућим истраживањима структура, својстава и примена ових система у науци и напредним технологијама.</p>	M54

НАПОМЕНА: уколико је кандидат објавио више од 3 рада, додати нове редове у овај део документа

ИСПУЊЕНОСТ УСЛОВА ЗА ОДБРАНУ ДОКТОРСКЕ ДИСЕРТАЦИЈЕ

Кандидат испуњава услове за оцену и одбрану докторске дисертације који су предвиђени Законом о високом

ДА **НЕ**

Образложење

Кандидат је положила све испите на Студијском програму ДАС Хемија и има објављене научне радове из области и теме докторске дисертације у часописима категорије M21 (2 рада) и M24 (1 рад), при чему је остварен индекс научне компетентности већи од 6 (шест) поена према критеријумима ресорног Министарства. Кандидат је првопотписани аутор на/у оба горе наведена рада. Кандидат има објављен рад и првопотписани је аутор на једном научном раду објављеном у часопису чији је издавач факултет Универзитета у Нишу.

ВРЕДНОВАЊЕ ПОЈЕДИНИХ ДЕЛОВА ДОКТОРСКЕ ДИСЕРТАЦИЈЕ

Кратак опис појединих делова дисертације (*до 500 речи*)

У уводном делу, у складу са усвојеном темом докторске дисертације, обрађени су следећи поднаслови: Предвиђање структура, својстава материјала и енергетски пејзажи; Чиста и допирана једињења на бази TiO_2 ; Хибридни органско-неоргански материјали. У основи теоријских метода описане су Хартри-Фок теорија; Теорија функционала густине (DFT); Базични сетови; Методе предвиђања структура [Метода атомске замене у примитивној хелији (РСАЕ); Генерисање 2D слабова и 3D суперфелија; Метода рударења података (ДМ)]; Методе структурне оптимизације [Локална оптимизација (ЛО)] и Визуализација структура. У експерименталном делу описани су принципи експерименталних метода: Рендгенска структурна анализа (XRD); Скенирајућа електронска микроскопија; ВЕТ метода порозиметрије и Фотокаталитичке реакције.

У оквиру резултата и дискусије докторске дисертације приказано је теоријско и експериментално испитивање материјала на бази TiO_2 и хибридни органско-неорганских система.

У првом делу анализирани су структура и својства чистог TiO_2 применом *ab initio* метода. Извршено је предвиђање могућих кристалних структура различитим приступима (РСАЕ, ДМ и суперфелије), након чега је спроведена њихова структурна оптимизација (ЛО). Добијене структуре су упоређене са доступним експерименталним подацима, док је стабилност система анализирана кроз зависности енергије од запремине и енталпије од притиска, а потом су испитана електронска својства материјала. Аналогна анализа је спроведена и за допирана једињења на бази TiO_2 (S, Au, Ag и Cu у различитим концентрацијама), а у наставку су приказани резултати са анализом утицаја допаната на структуру и својства.

Експериментални део рада обухвата синтезу и карактеризацију наноструктурних прахова TiO_2 у кристалној модификацији анатаза, допираних различитим концентрацијама Au, Ag и Cu. Карактеризација материјала извршена је применом XRD, SEM и ВЕТ метода, чиме су одређени фазни састав, морфологија површине и порозност узорака. Испитана је њихова потенцијална примена у фотокаталитичким реакцијама кроз анализу ефикасности уклањања и разградње Кристал љубичасте боје из раствора различитих почетних концентрација. Добијени експериментални резултати послужили су за верификацију и потврду теоријских предвиђања и усклађености са подацима доступним у литератури.

У другом делу испитивани су хибридни органско-неоргански материјали, укључујући интеракције аминокиселине глутамин са 2D структурама на бази TiO_2 , недопираним и допираним Au, Ag и Cu, као и 3D перовскитске системе. Анализирани су енергетски пејзажи и структурне карактеристике различитих конфигурација. У том циљу извршено је генерисање 2D структура (слабова) и различитих конформација аминокиселине, као и генерисање хибридни 3D перовскитских структура са органским катјоном гванидинијума и различитим неорганским катјонима и ањонима применом ДМ методе. Након тога је спроведена структурна оптимизација генерисаних модела методом ЛО, уз упоредну анализу добијених структура.

Добијени резултати пружају увид у везу између структуре и својстава испитиваних материјала и доприносе бољем разумевању њихових потенцијалних примена. У дисертацији су систематски испитана структурна, електронска и фотокаталитичка својства чистог и допираног TiO_2 , као и хибридни органско-неорганских система. Закључује се да избор рачунске методологије значајно утиче на резултате, као и да допирање мења стабилност, електронску структуру и фотокаталитичку активност материјала. Експериментални резултати потврдили су теоријска предвиђања и указали на високу ефикасност допираних система. Истраживања хибридни структура и перовскита омогућила су боље разумевање структурно-својствених односа и потенцијалних примена у медицини, енергетици, фотокатализи и хемији животне средине. За сваки од испитиваних система идентификовани су најперспективнији кандидати у складу са претпостављеним применама, што представља значајну основу за даља истраживања и примену ових материјала.

ВРЕДНОВАЊЕ РЕЗУЛТАТА ДОКТОРСКЕ ДИСЕРТАЦИЈЕ

Ниво остваривања постављених циљева из пријаве докторске дисертације (*до 200 речи*)

У овој докторској дисертацији су идентификоване стабилне и метастабилне модификације титан(IV)-оксида и њихови фазни прелази под различитим условима притиска и температуре. Испитане су и допирани структуре TiO_2 , а анализирана је зависност њихових структурних и електронских својстава од врсте и концентрације допаната.

Остварен је увид у интеракције органско-неорганских система, укључујући допирани 2D структуре анатаза са аминокиселином глутамином, које указују на потенцијалне примене у медицини и нанотехнологији. Испитана су структура и својства хибридни перовскита, при чему је утврђена зависност енергетског процепа од неорганских

катјона и анјона, омогућавајући фино подешавање електронских својстава и примену у производњи безоловних соларних ћелија, уз допринос у развоју обновљивих извора енергије и очувању животне средине.

Експериментално су синтетисане и карактерисане допиране наноструктуре анатаза са Au, Ag и Cu у различитим концентрацијама, а потом и потврђена теоријска предвиђања у виду ефикасне примене у одабраним фотокаталитичким реакцијама.

Допирање је значајно побољшало својства испитиваних материјала, а за сваки систем идентификовани су најперспективнији кандидати за конкретне примене. Добијени резултати пружили су важне увиде за будућа моделовања и поновљивост метода и софтвера на сличним системима, доприносећи бољем разумевању структурно-својствених односа и развоју нових материјала за енергетику, медицину и заштиту животне средине.

Вредновање значаја и научног доприноса резултата дисертације (до 200 речи)

Резултати ове докторске дисертације имају значајан научни и технолошки допринос у области материјала заснованих на титан(IV)-оксиду и хибридном органско-неорганским структурама. Дисертација повезује теоријска предвиђања и експерименталне резултате, показујући утицај рачунских методологија и допирања на стабилност, електронску структуру и фотокаталитичку активност материјала.

Идентификовани су најперспективнији кандидати за потенцијалне примене у медицини, енергетици, фотокатализи и заштити животне средине, уз дубље разумевање структурно-својствених односа. Синтеза и карактеризација допираних наноматеријала потврдиле су теоријска предвиђања и показале побољшану фотокаталитичку ефикасност уз релативно економичну поновљивост експерименталних приступа. Добијени резултати омогућавају поуздана будућа моделовања и поновљивост теоријских приступа, док примењени итеративни метод ефикасно смањује рачунарске ресурсе и време, што је од великог значаја за примену развијених метода и софтвера на истим или сродним хемијским системима.

Научни допринос огледа се у унапређеном разумевању својстава недопираног и допираног TiO_2 (са одабраним допантима), као и хибридни органско-неорганских система, док на технолошком нивоу резултати представљају основу за развој нових материјала са потенцијалном применом у индустрији, медицини и заштити животне средине.

Оцена самосталности научног рада кандидата (до 100 речи)

Кандидат је показала висок степен самосталности током израде докторске дисертације. Кандидат је самостално планирала и реализовала истраживања, активно учествовала у свим фазама истраживачког рада, укључујући обраду резултата и писање текста дисертације. Добијени резултати су систематизовани, критички сагледани и објављени у релевантним међународним часописима, што додатно потврђује ниво самосталности и научне зрелости кандидата.

ЗАКЉУЧАК (до 100 речи)

На основу свеобухватне анализе докторске дисертације, вредновања њених појединачних делова, остварених резултата и објављених научних радова, Комисија закључује да кандидат Душица Јовановић испуњава све услове прописане Законом о високом образовању, Статутом Универзитета у Нишу и Статутом Природно-математичког факултета у Нишу за одбрану докторске дисертације под насловом: „Предвиђање структура, енергетски пејзажи и испитивање својстава чистих и допираних једињења на бази TiO_2 и хибридни органско-неорганских материјала“.

КОМИСИЈА

Број одлуке Научно-стручног већа за природно математичке науке о именовану Комисије

НСВ БРОЈ 817-01-4/26-9

Датум именовања Комисије

06.04.2026.

Р. бр.	Име и презиме, звање		Потпис
1.	др Јелена Загорац, научни саветник	председник	Jelena Zagonac
	НО: Хемија УНО: Хемија	Институт за нуклеарне науке „Винча“ Универзитета у Београду	
	(Научна област)	(Установа у којој је запослен)	
2.	др Александра Зарубица, редовни професор	ментор, члан	A. Zarbonica
	НО: Хемија УНО: Примењена и индустријска хемија	Природно-математички факултет Универзитета у Нишу	
	(Научна област)	(Установа у којој је запослен)	
3.	др Марјан Ранђеловић, редовни професор	члан	M. Rankelovic
	НО: Хемија УНО: Примењена и индустријска хемија	Природно-математички факултет Универзитета у Нишу	
	(Научна област)	(Установа у којој је запослен)	
4.	др Радомир Љупковић, научни сарадник	члан	Radomir Ljupkovic
	НО: Хемија УНО: Примењена и индустријска хемија	Природно-математички факултет Универзитета у Нишу	
	(Научна област)	(Установа у којој је запослен)	
5.	др Тамара Шкундрић, научни сарадник	члан	Tamara Skundric
	НО: Хемија УНО: Хемија	Институт за нуклеарне науке „Винча“ Универзитета у Београду	
	(Научна област)	(Установа у којој је запослен)	

Датум и место:

.....