

ОСНОВНИ ПОДАЦИ

Име и презиме	Душица Симијонових
Година и место рођења	1982. Јагодина
Звање	Научни сарадник
Е-mail	dusica.simijonovic@pmf.kg.ac.rs
Образовно-научно / образовно-уметничко поље	Хемија
Универзитет, факултет, организациона јединица	Универзитет у Крагујевцу, Институт за информационе технолгије
Област и ужа научна област	Природно-математичке науке - хемија

ОБРАЗОВАЊЕ

ОСНОВНЕ СТУДИЈЕ

Година	2001.-2007.
Место	Крагујевац
Институција	Природно-математички факултет

МАСТЕР СТУДИЈЕ ИЛИ МАГИСТАРСКЕ

Година	/
Место	/
Институција	/

ДОКТОРСКА ДИСЕРТАЦИЈА

Година	2007.-2014.
Место	Крагујевац
Институција	Природно-математички факултет

Наслов докторске дисертације	Деривати етаноламина као јонске течности и прекуртори биолошки и каталитички активних Pd(II)-комплекса
Научно звање	Доктор наука – Хемијске науке
Област	Хемијске науке

СТРУЧНА БИОГРАФИЈА – ИЗБОРИ У ИСТРАЖИВАЧКА ОДНОСНО НАУЧНА ЗВАЊА

Датум избора	Институција	Звање
28.05.2008.	Природно-математички факултет у Крагујевцу	Истраживач-приправник
16.02.2011. 16.01.2014.	Природно-математички факултет у Крагујевцу	Истраживач-сарадник
29.04.2015.	Природно-математички факултет у Крагујевцу	Научни сарадник

СТРУЧНА БИОГРАФИЈА - УСАВРШАВАЊЕ

Година	Институција	Трајање
2016./2017.	Аристотелов универзитет у Солуну, Департман за органску хемију	6 месеци

НАУЧНО-ИСТРАЖИВАЧКИ РАД¹

Списак резултата М11	Број
----------------------	------

¹ Публикације и други истраживачки доприноси према важећој класификацији Министарства (Правилник о поступку, начину вредновања и квантитативном исказивању научноистраживачких резултата истраживача, www.mpn.gov.rs/wp-content/uploads/2017/03/Pravilnik-2017-preciscen-tekst.pdf) **за последње четири године;**

Истакнута монографија међународног значаја	
Списак резултата M12 Монографија међународног значаја	Број
Списак резултата M13 Монографска студија/поглавље у књизи M11 или рад у тематском зборнику водећег међународног значаја	Број
Списак резултата M14 Монографска студија/поглавље у књизи M12 или рад у тематском зборнику међународног значаја	Број
Списак резултата M21a Рад у међународном часопису изузетних вредности	Број
Списак резултата M21 Рад у врхунском међународном часопису	Број 8
1. Dušica Simijonović, Evangelia-Eirini Vlachou, Zorica D. Petrović, Dimitra J. Hadjipavlou-Litina, Konstantinos E. Litinas, Nevena Stanković, Nezirina Mihović, Milan P. Mladenović, Dicoumarol derivatives: Green synthesis and molecular modelling studies of their anti-LOX activity, <i>Bioorganic Chemistry</i>, (2018), vol. 80, str. 741-752, DOI: 10.1016/j.bioorg.2018.07.021 2. Vladimir P. Petrović, Dušica Simijonović, Vesna M. Milovanović, Zorica D. Petrović, Acetophenone Mannich bases: study of ionic liquid catalysed synthesis and antioxidative potential of products, <i>Royal Society Open Science</i>, (2018), vol. 5 str. 181232-181243, DOI: 10.1098/rsos.181232	

3. Vladimir P. Petrović, Marko N. Živanović, **Dušica Simijonović**, Jelena Đorović, Zorica D. Petrović, Snežana D. Marković, Chelate *N,O*-palladium(II) complexes: synthesis, characterization and biological activity, *RSC Advances*, (2015), vol. 5, str. 86274-86281, DOI: 10.1039/c5ra10204a
4. Zorica D. Petrović, Jelena Đorović, **Dušica Simijonović**, Vladimir P. Petrović, Zoran Marković, Experimental and theoretical study of antioxidative properties of some salicylaldehyde and vanillic Schiff bases, *RSC Advances*, (2015), vol. 5, str. 24094-24100, DOI: 10.1039/c5ra02134k
5. Vladimir P. Petrović, **Dušica Simijonović**, Marko N. Živanović, Jelena V. Košarić, Zorica D. Petrović, Svetlana Marković, Snežana D. Marković, Vanillic Mannich bases: synthesis and screening of biological activity. Mechanistic insight into the reaction with 4-chloroaniline, *RSC Advances*, (2014), vol. 4, str. 24635-24644, DOI: 10.1039/c4ra03909b
6. Zorica D. Petrović, Vladimir P. Petrović, **Dušica Simijonović**, Svetlana Marković, Insight into hydrolytic reaction of *N*-acetylated L-histidylglycine dipeptide with novel mechlorethamine platinum(II) complex. NMR and DFT study of the hydrolytic reaction, *Dalton Transactions*, (2011), vol. 40, str. 9284-9288, DOI: 10.1039/c1dt10593k
7. Zorica D. Petrović, **Dušica Simijonović**, Vladimir P. Petrović, Svetlana Marković, Diethanolamine and *N,N*-diethylethanolamine ionic liquids as precatalyst precursors and reaction media in green Heck reaction protocol, *Journal of Molecular Catalysis A: Chemical*, (2010), vol. 327, str. 45-50, DOI: 10.1016/j.molcata.2010.05.010
8. Zorica D. Petrović, Vladimir P. Petrović, **Dušica Simijonović**, Svetlana Marković, Mechanistic pathways for oxidative addition of aryl iodides to the low-ligated diethanolamine palladium(0) complex in phosphine-free Heck reactions, *Journal of Organometallic Chemistry*, (2009), vol. 694, str. 3852-3858, DOI:10.1016/j.jorganchem.2009.07.043

Списак резултата М22 Рад у истакнутом међународном часопису	Број 14
1. Vesna Milovanović, Zorica D. Petrović, Slađana Novaković, Goran A. Bogdanović, Dušica Simijonović, Vladimir P. Petrović, Structural characterization of benzoyl-1<i>H</i>-pyrazole derivatives obtained in lemon juice medium: Experimental and theoretical approach, <i>Journal of Molecular Structure</i>, (2019), vol. 1195, str. 85-94, DOI: 10.1016/j.molstruc.2019.05.095 2. Dušica Simijonović, Zorica D. Petrović, Vesna M. Milovanović, Vladimir P. Petrović, Goran A. Bogdanović, A new efficient domino approach for the synthesis of pyrazolyl-phthalazine-diones. Antiradical activity of novel phenolic products, <i>RSC Advances</i>, (2018), vol. 8, str. 16663-16673, DOI: 10.1039/c8ra02702a 3. Vladimir P. Petrović, Marko N. Živanović, Dušica Simijonović, Jelena Đorović, Zorica D. Petrović, Snežana D. Marković, Study of the structure, prooxidative, and cytotoxic activity of some chelate copper(II) complexes, <i>Chemical Papers</i>, (2017), vol. 71, str. 2075-2083, DOI: 10.1007/s11696-017-0200-1 4. Jelena Đorović, Zoran Marković, Zorica D. Petrović, Dušica Simijonović, Vladimir P. Petrović, Theoretical analysis of the experimental UV-Vis absorption spectra of some phenolic Schiff bases, <i>Molecular Physics</i>, (2017), vol. 115, str. 2460-2468, DOI: 10.1080/00268976.2017.1324183 5. Zoran Marković, Jelena Đorović, Zorica D. Petrović, Vladimir P. Petrović, Dušica Simijonović, Investigation of the antioxidant and radical scavenging activities of some phenolic Schiff bases with different free radicals, <i>Journal of Molecular Modeling</i>, (2015), vol. 21, str. 293, DOI: 10.1007/s00894-015-2840-9 6. Vladimir P. Petrović, Dušica Simijonović, Zorica D. Petrović, Svetlana Marković, Formation of a vanillic Mannich base – theoretical study, <i>Chemical Papers</i>, (2015), vol. 69, str. 1244-1252, DOI: 10.1515/chempap-2015-0123 7. Dušica Simijonović, Zorica D. Petrović, Vladimir P. Petrović, Some physico-chemical properties of ethanolamine ionic liquids: Behavior indifferent solvents, <i>Journal of Molecular Liquids</i>, (2013), vol. 179, str. 98-103, DOI: 10.1016/j.molliq.2012.12.020	

8. Ivana Radojević, Zorica D. Petrović, Ljiljana Čomić, **Dušica Simijonović**, Vladimir P. Petrović, Biological evaluation of mechlorethamine-Pt(II) complex, part II: Antimicrobial screening and LOX study of the complex and its ligand, Medicinal Chemistry, (2012), vol. 8, str. 947-952, DOI: 1573-4064/12 \$58.00+.00
9. Tanja Perić, Vladimir Lj. Jakovljević, Vladimir Zivković, Jelena Krkeljić, Zorica D. Petrović, **Dušica Simijonović**, Slobodan Novokmet, Dragan M. Djurić, Slobodan M. Janković, Toxic Effects of Palladium Compounds on the Isolated Rat Heart, Medicinal Chemistry, (2012), vol. 8, str. 9-13, DOI: 1875-6638/12 \$58.00+.00
10. Zorica D. Petrović, Vladimir P. Petrović, **Dušica Simijonović**, Svetlana Marković, Stereoselective homogeneous catalytic arylation of methyl methacrylate: Experimental and computational study, Journal of Molecular Catalysis A: Chemical, (2012), vol. 356, str. 144-151, DOI: 10.1016/j.molcata.2012.01.007
11. Zorica D. Petrović, Svetlana Marković, Vladimir P. Petrović, **Dušica Simijonović**, Triethanolammonium acetate as a multifunctional ionic liquid in the palladium-catalyzed green Heck reaction, Journal of Molecular Modeling, (2012), vol. 18, str. 433-440, DOI 10.1007/s00894-011-1052-1
12. Alexandru T. Balaban, Ivan Gutman, Svetlana Marković, **Dušica Simijonović**, Local aromaticity in benzo- and benzocyclobutadieno-annelated anthracenes, Monatshefte Fur Chemie, (2011), vol. 142, str. 797-800, DOI 10.1007/s00706-011-0531-5
13. Zorica D. Petrović, Dimitra Hadjipavlou-Litina, Eleni Pontiki, **Dušica Simijonović**, Vladimir P. Petrović, Diethanolamine Pd(II) complexes in bioorganic modeling as model systems of metallopeptidases and soybean lipoxygenase inhibitors, Bioorganic Chemistry, (2009), vol. 37, str. 162-166, DOI:10.1016/j.bioorg.2009.07.003
14. Zorica D. Petrović, Svetlana Marković, **Dušica Simijonović**, Vladimir Petrović, Mechanistic insight into preactivation of a modern palladium catalyst precursor in phosphine-free Heck reactions, Monatshefte Fur Chemie, (2009), vol. 140, str. 371-374, DOI: 10.1007/s00706-008-0035-0

1. Zorica D. Petrović, Jelena Đorović, **Duška Simijonović**, Snežana Trifunović, Vladimir P. Petrović, *In vitro* study of iron coordination properties, anti-inflammatory potential, and cytotoxic effects of *N*-salicylidene and *N*-vanillidene anil Schiff bases, *Chemical Papers*, (2018), vol. 72, str. 2171-2180, DOI: 10.1007/s11696-018-0419-5
2. Zorica D. Petrović, **Duška Simijonović**, Jelena Đorović, Vesna Milovanović, Zoran Marković, Vladimir 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), vol. 2, str. 11187-11194, DOI: 10.1002/slct.201701873
3. Vladimir P. Petrović, **Duška Simijonović**, Slađana B. Novaković, Goran A. Bogdanović, Svetlana Marković, Zorica D. Petrović, Structural characterisation of some vanillic Mannich bases: Experimental and theoretical study, *Journal of Molecular Structure*, (2015), vol. 1098, str. 34-40, DOI: 10.1016/j.molstruc.2015.05.040
4. Vladimir P. Petrović, **Duška Simijonović**, Zorica D. Petrović, Use of diethanolammonium–tetrachloridopalladate(II) complex in bioorganic modelling as artificial metallopeptidase in the reaction with *N*-acetylated L-methionylglycine dipeptide. NMR and DFT study of the hydrolytic reaction, *Journal of Molecular Structure*, (2014), vol. 1060, str. 38-41, DOI: 10.1016/j.molstruc.2013.12.026
5. Zorica D. Petrović, Ljiljana Čović, Olgica Stevanović, **Duška Simijonović**, Vladimir P. Petrović, Antimicrobial activity of the ionic liquids triethanolamine acetate and diethanolamine chloride, and their corresponding Pd(II) complexes, *Journal of Molecular Liquids*, (2012), vol. 170, str. 61-65, DOI:10.1016/j.molliq.2012.03.009
6. Alexandru T. Balaban, Ivan Gutman, Svetlana Marković, **Duška Simijonović**, Jelena Đurđević, Local Aromaticity in Benzo and Benzocyclobutadieno-Annulated Phenanthrenes, *Polycyclic Aromatic Compounds*, (2011), vol. 31, str. 339-349, DOI: 10.1080/10406638.2011.614179

Списак резултата М24

Рад у националном часопису међународног значаја

Број

Списак резултата М33 Саопштење са међународног скупа штампано у целини	Број 2
1. Dušica Simijonović, Zorica D. Petrović, Ivana D. Radojević, Ljiljana R. Čomić, Vladimir P. Petrović, Vesna Milovanović, Antimicrobial activity of substituted pyrazoles, ISER International Conference on Science, Health and Medicine (ICSHM), Book of abstracts pp. 19-23, Florence, Italy, 19-20 July, 2019. 2. Vesna M. Milovanović, Zorica D. Petrović, Dušica Simijonović, Vladimir P. Petrović, Jovica Branković, Antioxidant activity of chromeno-pyrimidine fused heterocycles obtained in green reaction, ISER International Conference on Science, Health and Medicine (ICSHM), Book of abstracts pp. 15-18, Florence, Italy, 19-20 July 2019.	
Списак резултата М34 Саопштење са међународног скупа штампано у изводу	Број 13
1. Jelena Đorović, Zoran Marković, Zorica Petrović, Dušica Simijonović, Vladimir Petrović, Examination of antioxidant activity of phenolic functionalized piperidine, The 29th International Course and Conference on the Interfaces among Mathematics, Chemistry and Computer Sciences (Math/Chem/Comp, MC2-29), Dubrovnik, Croatia, 17-24. Jun 2017. 2. Vesna Milovanović, Zorica D. Petrović, Dušica Simijonović, Vladimir P. Petrović, Green synthesis, structure and antioxidative activity of the highly functionalized tetrahydropyridines, International Meeting on Medicinal and Bio(in)organic Chemistry, Vrnjačka Banja, Serbia, 26-31. August 2017, Book of Abstracts p. 24. 3. Dušica Simijonović, Konstantinos E. Litinas, Dimitra J. Hadjipavlou-Litina, Multicomponent reactions of phthalhydrazide, 4-hydroxycoumarin and aldehydes under microwaves. Biological study of the received products, 22th Panel. Chem. Congr., Greece, 2-4. December 2016, Book of Abstracts, pp. 253-253. 4. Vladimir P. Petrović, Dušica Simijonović, Zorica D. Petrović, Milena Lukić, Antioxidant activity of some vanillic Mannich bases,	

- International Conference on Hydrogen Atom Transfer iCHAT, Rome, Italy, June 22-26, 2014, Book of abstracts P26, p. 88.
5. **Duška Simijonović**, Vladimir P. Petrović, Zorica D. Petrović, Ljiljana Čomić, Olgica Stefanović, Biological activity of the diethanolamine and triethanolamine ionic liquids and its corresponding palladium(II) complexes, 15h Hellenic Symposium on Medicinal Chemistry, Athens, Greece, May 25-27, 2012, Book of abstracts, p. 123.
 6. Vladimir P. Petrović, **Duška Simijonović**, Ana Petrović, Mechlorethamine platinum(II) complex as an artificial metallopeptidase, 15h Hellenic Symposium on Medicinal Chemistry, Athens, Greece, May 25-27, 2012, Book of abstracts, p. 119.
 7. Zorica D. Petrović, Vladimir P. Petrović, Svetlana Marković, **Duška Simijonović**, Dimitra Hadjipavlou-Litina, Classical and non-classical alkylating agent in one. Novel Pt(II) - mechlorethamine complex as artificial metallopeptidase and soybean lipoxygenase inhibitor, 12th Tetrahedron Symposium: Challenges in Organic and Bioorganic Chemistry, Sitges, Spain, 2011, June 21-24, Book of abstracts, P1.142.
 8. Zorica D. Petrović, Dimitra Hadjipavlou-Litina, Eleni Pontiki, **Duška Simijonović**, Vladimir Petrović, Mechlorethamine Pd(II) and Pt(II) complexes as inhibitors of soybean lipoxygenase and their antiradical activity, 14h Hellenic Symposium on Medicinal Chemistry, Thessaloniki, Greece, April 23-25, 2010, Book of abstracts, p. 85.
 9. Zorica Petrović, **Duška Simijonović**, Vladimir Petrović, Diethanolammonium acetate as ionic liquid and ligand precursor in green Heck reaction protocol, Second Humboldt conference on noncovalent interactions, Vršac, Serbia, October 22-25, 2009, Book of abstracts, p. 50.
 10. Vladimir P. Petrović, Zorica D. Petrović, **Duška Simijonović**, Svetlana Marković, New diethanolamine palladium(II) complex as artificial metallopeptidase and free radical scavenger, 10th International Symposium on Applied Bioinorganic Chemistry, Debrecen, Hungary, September 25-28, Book of Abstracts, p. 114. ISBN: 978-963-473-307-2
 11. **Duška Simijonović**, Zorica D. Petrović, Marija Vukašinović, Vesna Kaljević, Vladimir P. Petrović, Nenad Vuković, Chemical view on

walnuts from country-side of Kragujevac, Euro Analysis, Innsbruck, Austria, September 6-10, 2009, Book of abstracts P070-A2.

12. Svetlana Marković, Zorica D. Petrović, Vladimir P. Petrović, **Dušica Simijonović**, Mechanism of the preactivation process of trans[PdCl₂(DEA)₂] in phosphine-free Heck reaction, Physical Chemistry, Beograd, Serbia, 2008, Book of abstracts C-18-O, p. 187.
13. Zorica D. Petrović, **Dušica Simijonović**, Vladimir P. Petrović, Diethanolamine: an useful ligand, base and reaction medium for phosphine-free Pd-catalyzed Heck reactions, 20th Congress of the Society of Chemists and Technologists of Macedonia, Ohrid, Macedonia, September 17-20, 2008, Book of Abstracts, SOS-23-E, p. 334. ISBN: 978-9989-760-06-8

Списак резултата М41 Истакнута монографија националног значаја	Број
Списак резултата М42 Монографија националног значаја	Број
Списак резултата М43 Монографска библиографска публикација или монографска студија	Број
Списак резултата М44 Поглавље у књизи М41 или рад у истакнутом тематском зборнику водећег националног значаја	Број
Списак резултата М45 Поглавље у књизи М42 или рад у тематском зборнику националног значаја	Број
Списак резултата М51 Рад у врхунском часопису националног значаја	Број

Списак резултата M52 Истакнути национални часопис	
Списак резултата M53 Национални часопис	Број
Списак резултата M54 Домаћи новопокренути научни часопис	
Списак резултата M60 Предавања по позиву на скуповима националног значаја- обавезно навести категорију	Број 4
1. Vesna Milovanović, Dušica Simijonović, Zorica D. Petrović, Vladimir P. Petrović, Mechanistic study of three-component Mannich reaction and characterization of the products, 55th Meeting of the Serbian Chemical Society, Novi Sad, Serbia June 8-9, 2018 Book of Abstracts OH P10 p. 98. 2. Dušica Simijonović, Vladimir P. Petrović, Vesna Milovanović, Zorica D. Petrović, Diastereoselective one-pot synthesis of vanillin-piperidine derivatives and investigation of their antioxidant activity, 53rd Meeting of the Serbian Chemical Society, Kragujevac, Serbia June 10-11, 2016 Book of Abstracts OH P21 p. 120. 3. Dušica Simijonović, Zorica D. Petrović, Vladimir P. Petrović, Marko N. Živanović, Snežana D. Marković, Sinteza i biološka aktivnost Pd(II)-kompleksa salicilaldehidno-anilinskih šifovih baza, 52. Savetovanje srpskog hemijskog društva, Novi Sad 2015, Kratki izvodi radova p. 117. 4. Zorica D. Petrović, Dušica Simijonović, Vladimir P. Petrović, <i>In vitro</i> inhibition of soybean lipoxygenase with new Pd(II)-triethanolamine complex and its precursors, 49th Meeting of the Serbian Chemical Society, Kragujevac, Serbia, May 13-14, 2011, Book of Abstracts OH22-P, p. 140, ISBN: 978-86-7132-045-0	

Списак резултата М80 Техничка решења – обавезно навести категорију	Број
Списак резултата М90 Патент– обавезно навести категорију	Број

УЧЕШЋЕ НА ПРОЈЕКТИМА РЕСОРНОГ МИНИСТАРСТВА

1. Пројекат број: (142013Б) „Биоактивни комплекси р- и d-јона метала са лигандима фармакотерапијског значаја” (период ангажовања 2009-2011; руководилац проф. др Предраг Ђурђевић);
2. Пројекат број: (172016) „Синтеза, моделовање, физичко-хемијске и биолошке особине органских једињења и одговарајућих комплекса метала” (период ангажовања: 2011-2019; руководилац проф. др Срећко Трифуновић);

УЧЕШЋЕ НА МЕЂУНАРОДНИМ ПРОЈЕКТИМА

1. Билатерални пројекат са Републиком Хрватском: „Испитивање хемизма и антиоксидативне активности комплекса полифенолних једињења са есенцијалним металима” (период ангажовања 2016-2017; руководиоци: проф. др Светлана Марковић и др Анте Миличевић);

УЧЕШЋЕ НА ПРОЈЕКТИМА СА ПРИВРЕДОМ

КРАТАК ОПИС ИСТРЖИВАЊА У ПРЕТХОДНОМ ПЕРИОДУ (задње четири године)

У претходном периоду истраживања су обухватала зелене синтезе потенцијално биолошки активних органских једињења. Синтетисана једињења припадају групи фенолних Шифових и Манихових база, као и групи азотних хетероцикличних једињења. За синтезе су као катализатори коришћене неке етаноламинске јонске течности, гликолна киселина и природан лако доступан катализатор – лимунов сок. Такође, остварене су и

синтезе неких метал-органичких комплекса са Шифовим базама као лигандима. За структурну карактеризацију овако добијених једињења коришћене су различите експерименталне и теоријске технике. Синтетисана једињења су подвргнута експерименталном испитивању њихове антиоксидативне, антиинфламаторне и антипролиферативне активности. Такође, за испитивање антиоксидативног потенцијала и проналажење највероватнијег антирадикалског механизма добијених једињења коришћене су компјутерске методе.

КРАТАК ОПИС ПЛАНИРАНИХ ИСТРЖИВАЊА У НАРЕДНОМ ПЕРИОДУ

У наредном периоду планира се наставак синтеза потенцијално биолошки активних једињења применом еколошки прихватљивих метода. Такође, наставиће се са испитивањем антиоксидативне и антиинфламаторне активности добијених једињења. Значајан допринос овим експерименталним истраживањима дају компјутерске методе молекулског моделовања. У вези са тим, додатно ће се испитати веза између структуре и активности испитиваних једињења, са циљем дизајнирања биолошки активнијих, а мање токсичних једињења.