

НАСТАВНО-НАУЧНОМ ВЕЋУ УНИВЕРЗИТЕТА У БЕОГРАДУ – ХЕМИЈСКОГ ФАКУЛТЕТА

Извештај комисије за избор др Соње Зрилић у звање научни сарадник

На седници Наставно-научног већа Универзитета у Београду – Хемијског факултета, одржаној 13. новембра 2025. године именовани смо у комисију за избор др Соње Зрилић у звање научни сарадник (одлука број 802/2).

Прегледом материјала који нам је достављен, као и на основу увида у њен научни рад и публикације, у складу са Законом о науци и истраживању („Службени гласник РС”, 49/2019) и Правилником о стицању истраживачких и научних звања („Службени гласник РС”, 80/2024), Наставно-научном већу Универзитета у Београду – Хемијског факултета подносимо овај

ИЗВЕШТАЈ

1. ПОДАЦИ О КАНДИДАТУ

Име и презиме:	Соња Зрилић
Година рођења:	1995.
Радни статус:	запослена
Назив институције у којој је запослен:	Иновациони центар Хемијског факултета

Образовање

Основне академске студије:	2014-2019, Универзитет у Београду – Факултет за физичку хемију
Одбрањен мастер или магистарски рад:	2020, Универзитет у Београду – Факултет за физичку хемију
Одбрањена докторска дисертација:	2025, Универзитет у Београду – Факултет за физичку хемију

Постојеће научно звање:	истраживач сарадник
Научно звање које се тражи:	научни сарадник

Датуми избора у стечена научна звања (укључујући и постојеће)

научни сарадник:	кандидат се први пут бира у звање
------------------	-----------------------------------

Област науке у којој се тражи звање:	природно-математичке науке
Грана науке у којој се тражи звање:	хемија
Научна дисциплина у којој се тражи звање:	теоријска хемија
Назив матичног научног одбора којем се захтев упућује:	МНО за хемију

Стручна биографија

Соња Зрилић рођена је 19. маја 1995. године у Београду. На Универзитету у Београду – Факултету за физичку хемију дипломирала је 2019. године, са просечном оценом 9,59. Дипломски рад из области квантне хемије под називом „Диполно-везана стања код HC_nN ($n = 3, 5, 7, 9$) анјона“ одбранила је оценом 10. Мастер академске студије на Факултету за физичку хемију уписала је 2019. године на смеру Спектрохемија, а завршила 2020. године са просечном оценом 10,00 одбравивши мастер рад под називом „Проучавање везивања малих

нуклеотидних молекула за G-квадруплекс са гуанинском шупљином“. Докторске академске студије на истом факултету уписала је 2020. године. Докторску дисертацију под насловом „Испитивање водоничних веза између комплекса аминокиселина са прелазним металима и воде анализом кристалографских података и методама квантне хемије“ одбранила је 2. октобра 2025. године, под менторством др Михајла Етинског, редовног професора Универзитета у Београду – Факултета за физичку хемију, и др Снежане Зарић, редовног професора Универзитета у Београду – Хемијског факултета.

Запослена је на Иновационом центру Хемијског факултета у Београду од 1. марта 2021. године, најпре као истраживач приправник, да би 12. октобра 2023. стекла звање истраживач сарадник.

Ангажована је на билатералном пројекту са Народном републиком Кином „Испитивање улоге ароматичних аминокиселина у увијању протеина употребом машинског учења и квантне механике“, чији је руководилац из Србије проф. др Снежана Зарић.

Профили у базама истраживача:

ORCID: 0000-0002-6689-0777

ResearcherID: AHE-8831-2022

ScopusID: 58030440300

2. ПРЕГЛЕД НАУЧНЕ АКТИВНОСТИ

Кандидат др Соња Зрилић бави се истраживачким радом у области теоријске хемије, који је усмерен на испитивање нековалентних интеракција у различитим системима.

Др Соња Зрилић се претежно бавила **испитивањем водоничних веза између комплекса аминокиселина са прелазним металима и воде**. Методолошки приступ подразумевао је претрагу Кембричке базе структурних података (Cambridge Structural Database – CSD) и квантохемијске прорачуне енергија интеракција и њихову декомпозицију. Резултати ових истраживања указали су да цвтерјони аминокиселина граде кратке и јаке водоничне везе са водом, често јаче од водоничних веза неутралних комплекса аминокиселина са водом. Пораст позитивног наелектрисања комплекса јача NH/O водоничну везу, док пораст негативног утиче на јачање водоничних веза O/HO типа. Показано је да укупна енергије интеракције генерално јача са порастом оксидационог и атомског броја јона метала и смањењем координационог броја јона метала за водоничну везу NH/O типа, док су у случају O/HO интеракција трендови обрнути. Природа ових водоничних веза је претежно електростатичка, док код слабих интеракција јача значај поларизације и дисперзије.

Кандидаткиња се бавила и **испитивањем нековалентних интеракција између полиимида и угљеничне нанотубе** (carbon nanotube – CNT). У оквиру овог истраживања, кандидаткиња се бавила квантохемијским прорачунима енергија интеракција и њиховом декомпозицијом за мономере два испитивана полимера (OPI и FPI) и CNT, са циљем проналажења узрока за њихове различите јачине везивања. Добијени резултати квантохемијских прорачуна показали су да OPI гради јаче интеракције са CNT него FPI, што је у сагласности са експерименталним резултатима. Показано је да је доминантна дисперзиона природа интеракције. Дубља анализа указала је да стерне сметње услед присуства C(CH₃)₂ групе ометају успостављање конформације FPI мономера у односу на CNT која би доводила до приближавања мономера површини CNT, а самим тим и већег преклапања орбитала и јаче дисперзионе интеракције, као што је то случај код OPI који нема ову волуминозну групу.

Још једна област истраживања кандидаткиње је **испитивање везивања молекула лиганада за G-квадруплекс**. У оквиру овог истраживања, кандидаткиња се бавила молекулско-

динамичким симулацијама коришћењем поља сила и прилагодљиве пристрасне силе (Adaptive Biasing Force – ABF). Истраживано је везивање познатог лиганда са порфиринским прстеном за ког је већ показано да има способност да се везује за G-квадруплекс (ТМРyP4), као и четири друга лиганда базирана на порфиринском прстену. ABF методом је испитан простор изнад врха G-квадруплекса приликом одвајања лиганда од овог везивног места и његовог удаљавања. Поређење површи Гибсових енергија интеракција приликом удаљавања различитих лиганада од везивног места на врху квадруплекса откривено је још једно потенцијално везивно место за један од лиганада (ТРyP4), код ког лиганд истовремено интерагује са азотним базама које не формирају G-квадруплекс. Додатном симулацијом показано је да ТРyP4 остаје везан на новом везивном месту и без ABF потенцијала.

3. ПРИКАЗ НАЈЗНАЧАЈНИЈИХ РЕЗУЛТАТА

Као најзначајнији рад кандидата издваја се:

S. S. Zrilić, J. M. Živković, S. D. Zarić, *Hydrogen bonds of a water molecule in the second coordination sphere of amino acid metal complexes: Influence of amino acid coordination*, J. Inorg. Biochem. 242 (2023) 112151. DOI: [10.1016/j.jinorgbio.2023.112151](https://doi.org/10.1016/j.jinorgbio.2023.112151); IF2 (2021) = 4,336

У оквиру овог рада испитиване су водоничне везе слободних и координованих аминокиселина са водом анализом података добијених претрагом Кембричке базе структурних података (енг. Cambridge Structural Database, CSD) и квантохемијским прорачунима. Резултати указују да цвтерјони аминокиселина услед раздвајања наелектрисања граде врло јаке водоничне везе, па не долази увек до јачања водоничних веза при координацији аминокиселине за прелазне метале. Показано је и да у случају наелектрисаних комплекса енергија водоничне везе са водом може постати врло јака. Кандидат је учествовао у изради, обради и анализи резултата претраге CSD и квантохемијских прорачуна, као и у писању рада чији је први аутор. Овај рад је први од пет радова који су проистекли из докторске дисертације кандидата.

4. ПОКАЗАТЕЉИ УСПЕХА У НАУЧНОИСТРАЖИВАЧКОМ РАДУ

4.1. Утицајност

Утицајност научних резултата др Соње Зрилић огледа се у цитираности публикованих радова чији је она аутор или коаутор. Према *Scopus* бази података укупан број цитата без аутоцитата је **21**, Хиршов (h) индекс за цитиране радове без аутоцитата је **3**. Укупан фактор утицаја (енг. *impact factor*, IF) свих радова је 28,961 (IF2 28,161).

4.2. Међународна научна сарадња

Нема.

4.3. Руковођење пројектима и потпројектима (радним пакетима)

Нема.

4.4. Уређивање научних публикација

Нема.

4.5. Предавања по позиву (осим на конференцијама)

Нема.

4.6. Рецензирање пројеката и научних резултата

Нема.

4.7. Образовање научних кадрова

Нема.

4.8. Награде и признања

Нема.

4.9. Допринос развоју одговарајућег научног правца

Нема.

5. БИБЛИОГРАФИЈА КАНДИДАТА

Рад у водећем међународном часопису категорије M21a:

Укупно бодова: 12

1. J. M. Živković, D. B. Ninković, S. S. Zrilić, S. D. Zarić, *The hydration effect on hydrogen bond strength in the second coordination sphere of ethylenediamine and glycine metal complexes*, J. Mol. Liq. (2025) 127835.

DOI: [10.1016/j.molliq.2025.127835](https://doi.org/10.1016/j.molliq.2025.127835)

Категорија: Physics, Atomic, Molecular & Chemical (6/40); IF2 (2023) = 5,3

Цитираност (без аутоцитата): 0

Број аутора: 4

Број бодова: 12

Радови у водећим међународним часописима категорије M21:

Укупно бодова: 32

2. S. S. Zrilić, J. M. Živković, S. D. Zarić, *Hydrogen bonds of a water molecule in the second coordination sphere of amino acid metal complexes: Influence of amino acid coordination*, J. Inorg. Biochem. 242 (2023) 112151.

DOI: [10.1016/j.jinorgbio.2023.112151](https://doi.org/10.1016/j.jinorgbio.2023.112151)

Категорија: Chemical, Inorganic & Nuclear (9/46); IF2 (2021) = 4,336

Цитираност (без аутоцитата): 8

Број аутора: 3

Број бодова: 8

3. S. S. Zrilić, J. M. Živković, S. D. Zarić, *Computational and crystallographic study of hydrogen bonds in the second coordination sphere of chelated amino acids with a free water molecule: Influence of complex charge and metal ion*, J. Inorg. Biochem. 251 (2024) 112442.

DOI: [10.1016/j.jinorgbio.2023.112442](https://doi.org/10.1016/j.jinorgbio.2023.112442)

Категорија: Chemical, Inorganic & Nuclear (9/44); IF2 (2022) = 3,9

Цитираност (без аутоцитата): 8

Број аутора: 3

Број бодова: 8

4. B. Zhang, S. D. Zarić, S. S. Zrilić, I. Gofman, B. Heck, G. Reiter, *London dispersion forces and steric effects within nanocomposites tune interaction energies and chain conformation*, Commun. Chem. 8, 1 (2025) 21.

DOI: [10.1038/s42004-025-01414-4](https://doi.org/10.1038/s42004-025-01414-4)
Категорија: Chemistry, Multidisciplinary (53/236); IF5 (2024) = 6,5; IF2 (2024) = 6,2
Цитираност (без аутоцитата): 5
Број аутора: 6
Број бодова: 8

5. S. S. Zrilić, D. B. Ninković, M. Etinski, S. D. Zarić, *Perturbational and Variational Energy Decomposition Analysis on Hydrogen Bonds of Coordinated Glycine and Water Molecule*, ChemPhysChem 26, 4 (2025) e202400948.

DOI: [10.1002/cphc.202400948](https://doi.org/10.1002/cphc.202400948)
Категорија: Physics, Atomic, Molecular & Chemical (10/38); IF5 (2023) = 2,8; IF2 (2023) = 2,3
Цитираност (без аутоцитата): 0
Број аутора: 4
Број бодова: 8

Радови у међународним часописима категорије M22:

Укупно бодова: 9,17 (нормирано према броју аутора)

6. I. Stanković, S. Zrilić, B. Milovanović, A. Stanojević, M. Petković, M. Etinski, *Binding symmetric porphyrins to c-MYC promoter Pu24I G-quadruplex: toward more specific ligand recognition by flanking bases*, New J. Chem. 47 (2023) 11176-11187.

DOI: [10.1039/D3NJ00956D](https://doi.org/10.1039/D3NJ00956D)
Категорија: Chemistry, Multidisciplinary (80/179); IF2 (2021) = 3,925
Цитираност (без аутоцитата): 0
Број аутора: 6
Број бодова: $5/(1+0,2(6-5)) = 4,17$

7. S. S. Zrilić, J. M. Živković, S. D. Zarić, *Hydrogen bonds of a water molecule in the second coordination sphere of amino acid metal complexes: influence of amino acid types on different complex geometries*, J. Coord. Chem. 77, 7-8 (2024) 825-842.

DOI: [10.1080/00958972.2024.2326898](https://doi.org/10.1080/00958972.2024.2326898)
Категорија: Chemical, Inorganic & Nuclear (23/44); IF2 (2023) = 2,2
Цитираност (без аутоцитата): 0
Број аутора: 3
Број бодова: 5

Саопштења са међународног скупа штампано у целини (M33):

Укупно бодова: 4

8. J. M. Živković, S. S. Zrilić, S. D. Zarić, *Comparison of NH...O Interaction of Coordinated Ammonia and Etylenediamine*, 16th International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry (PC2022), 26-30 September 2022, Belgrade, Serbia, Online Event, Proceedings Volume II, str. 523-526.

Број бодова: 1

9. S. S. Zrilić, J. M. Živković, S. D. Zarić, *Influence of phthalimide substitution on the interaction with carbon nanotube*, 2nd International Conference on Chemo and Bioinformatics (ICCBIG_2023), 28-29 September 2023, Kragujevac, Serbia, Book of Proceedings, str. 662-665.

Број бодова: 1

10. S. S. Zrilić, J. M. Živković, S. D. Zarić, *Interaction energy and decomposition of interaction energy of halo-substituted phthalimide with carbon nanotube*, 2nd International Conference on Chemo and Bioinformatics (ICCBIG_2023), 28-29 September 2023, Kragujevac, Serbia, Book of Proceedings, str. 666-669.

Број бодова: 1

11. S. S. Zrilić, J. M. Živković, D. B. Ninković, S. D. Zarić, *Quantum Theory of Atoms In Molecules Analysis of NH/O Hydrogen Bonds of Glycine Complexes with a Water Molecule*, 3rd International Conference on Chemo and Bioinformatics (ICCBIG_2025), 25-26 September 2025, Kragujevac, Serbia, Book of Proceedings, str. 654-657.

Број бодова: 1

Саопштења са међународног скупа штампано у изводу (M34):

Укупно бодова: 2

12. S. S. Zrilić, J. M. Živković, S. D. Zarić, *Hydrogen Bonds of Free and Coordinated Amino Acids with Water Molecule*, 2nd International Conference on Noncovalent Interactions (ICNI-2022), 18-22 July 2022, Strasbourg, France, Book of Abstracts, str. 169.

Број бодова: 0,5

13. S. S. Zrilić, J. M. Živković, *Influence of the various factors on the strength of hydrogen bonds of the coordinated amino acids*, 3rd International Conference on Noncovalent Interactions (ICNI2024), 17-21 June 2024, Belgrade, Serbia, Book of Abstracts, str. 122.

Број бодова: 0,5

14. S. S. Zrilić, I. Stanković, B. Milovanović, M. Petković, M. Etinski, *Ligand recognition by flanking bases: exploring symmetric porphyrins for c-MYC promoter Pu241 G-quadruplex*, 3rd International Conference on Noncovalent Interactions (ICNI2024), 17-21 June 2024, Belgrade, Serbia, Book of Abstracts, str. 172.

Број бодова: 0,5

15. S. S. Zrilić, D. B. Ninković, M. Etinski, S. D. Zarić, *Nature of hydrogen bonds of coordinated glycine complexes with water*, 4th European Symposium on Chemical Bonding (CBOND2024), Amsterdam, Holandija, 24-27 September 2024, Abstract Book, str. 76.

Број бодова: 0,5

Саопштења са скупа националног значаја штампано у изводу (M64):

Укупно бодова: 2,5

16. J. M. Živković, S. S. Zrilić, M. M. Milovanović, S. D. Zarić, *Uticaj koordinacije na jačinu NH...O interakcije*, 58. Savetovanje Srpskog hemijskog društva, 2022, Beograd, Srbija, Izvodi radova, str. 155.

Број бодова: 0,5

17. S. S. Zrilić, J. M. Živković, S. D. Zarić, *Three types of hydrogen bonds of free and coordinated amino acids with water molecule*, 8th Conference of Young Chemists of Serbia (8CYCS), 29th October 2022, University of Belgrade, Faculty of Chemistry, Belgrade, Serbia, Book of Abstracts, str. 139.

Број бодова: **0,5**

18. S. S. Zrilić, J. M. Živković, S. D. Zarić, *The importance of the metal ion and complex geometry on the interaction between a coordinated amino acid and a free water molecule*, 9th Conference of Young Chemists of Serbia (9CYCS), 4th November 2023, University of Novi Sad – Faculty of Science, Novi Sad, Serbia, Book of Abstracts, str. 108.

Број бодова: **0,5**

19. S. S. Zrilić, D. B. Ninković, M. Etinski, S. D. Zarić, *Energy decomposition analysis of hydrogen bonds of coordinated glycine complexes with water*, 10th Conference of Young Chemists of Serbia (10CYCS), 26 October 2024, University of Belgrade – Faculty of Chemistry, Belgrade, Serbia, str. 117.

Број бодова: **0,5**

20. S. S. Zrilić, J. M. Živković, D. B. Ninković, S. D. Zarić, *Strong CH/O hydrogen bonds of phenanthroline transition metal complexes and water*, 11th Conference of Young Chemists of Serbia (11CYCS), 25 October 2025, University of Kragujevac – Faculty of Science, Kragujevac, Serbia, str. 85.

Број бодова: **0,5**

Докторска дисертација (M70):

Укупно бодова: **6**

Соња С. Зрилић, „Испитивање водоничних веза између комплекса аминокиселина са прелазним металима и воде анализом кристалографских података и методама квантне хемије“, 2. октобар 2025, Универзитет у Београду – Факултет за физичку хемију.

Број бодова: **6**

6. КВАНТИФИКАЦИЈА НАУЧНИХ РЕЗУЛТАТА КАНДИДАТА

Врста резултата	Вредност резултата (Прилог 2)	Укупан број резултата (укупан број резултата који подлежу нормирању)	Укупан број бодова (укупан број бодова након нормирања)
M21a	12	1 (0)	12 (12)
M21	8	4 (0)	32 (32)
M22	5	2 (1)	10 (9,17)
M33	1	4 (0)	4 (4)
M34	0,5	4 (0)	2 (2)
M64	0,5	5 (0)	2,5 (2,5)
M70	6	1 (0)	6 (6)
УКУПНО			68,5 (67,67)

Поређење са минималним квантитативним условима за избор у тражено научно звање

Диференцијални услов за оцењивани период за избор у научно звање: научни сарадник	Неопходно	Остварени нормирани број бодова
Укупно	16	67,67
Обавезни: M11+M12+ M21+M22 +M23+M91+M92+M93	6	53,17

7. ЗАКЉУЧАК И ПРЕДЛОГ КОМИСИЈЕ

Комисија је, у складу са Правилником о стицању истраживачких и научних звања, извршила анализу научноистраживачке активности др Соње Зрилић, истраживача сарадника Иновационог центра Хемијског факултета у Београду, у поступку избора у звање научни сарадник.

Кандидаткиња је различите методе теоријске хемије, које обухватају квантохемијске прорачуне, молекулску динамику и претрагу и анализу Кембричке базе структурних података применила у истраживањима која се могу поделити у три главна правца: 1) испитивање водоничних веза комплекса аминокиселина и воде, 2) испитивање нековалентних интеракција полиимида са угљеничним нанотубама, и 3) везивање молекула лиганда за G-квадруплекс. Постигнуте резултате из ових области објавила је у оквиру седам научних радова у часописима са SCI листе, од којих је један објављен у водећем међународном часопису категорије M21a, четири у водећим међународним часописима категорије M21 и два у међународним часописима категорије M22. Од објављених седам радова, на четири рада је први аутор. Поред тога, коаутор је четири саопштења са међународних скупова штампана у целини (M33), четири саопштења са међународних скупова штампана у изводу (M34) и пет саопштења са скупова националног значаја штампаних у изводу (M64). Укупна вредност M коефицијента износи 67,67, што значајно премашује неопходних 16 поена за избор у звање научни сарадник.

На основу изложеног, комисија је утврдила да кандидат испуњава све услове прописане Законом о науци и истраживањима и Правилнику о стицању научних и истраживачких звања те са задовољством предлаже Наставно-научном већу Универзитета у Београду – Хемијског факултета да прихвати предлог за избор **др Соње Зрилић** у научно звање **научни сарадник** и упутити извештај надлежном телу Министарства науке, технолошког развоја и иновација на даље одлучивање.

У Београду, 12. 12. 2025. године

Чланови комисије



проф. др Снежана Зарић
редовни професор
Универзитет у Београду – Хемијски факултет



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



проф. др Михајло Етински
редовни професор
Универзитет у Београду – Факултет за физичку хемију



др Јелена Живковић
виши научни сарадник
Иновациони центар Хемијског факултета у Београду



др Драган Нинковић
виши научни сарадник
Универзитет у Београду – Институт за хемију, технологију и металургију