

# НАСТАВНО-НАУЧНОМ ВЕЋУ ФИЗИЧКОГ ФАКУЛТЕТА УНИВЕРЗИТЕТА У БЕОГРАДУ

На III седници Наставно-научног већа Физичког факултета Универзитета у Београду одржаној 22. 12. 2021. године смо изабрани за чланове Комисије за преглед и оцену докторске дисертације под насловом

## „Електронски транспорт и ректификација трансверзалне електричне струје кроз ДНК нуклеотиде у нанопроцепу ”

(наслов на енглеском језику: *Electronic transport and rectification of transversal electric current through DNA nucleotides in a nanopore*)

коју је кандидаткиња **Ивана Ђуришић**, дипломирани физичар, предала Физичком факултету Универзитета у Београду. Након прегледа достављене дисертације подносимо следећи

## ИЗВЕШТАЈ

### 1. Основни подаци о кандидату

#### 1.1 Биографски подаци

Ивана (Вучина) Ђуришић је рођена 1980. године у Беранама, Република Црна Гора, где је завршила Основну школу и Гимназију. Уписала је физику на Природно-математичком факултету, Универзитета Црне Горе у Подгорици школске 1999/2000. године где је завршила прву годину студија. Другу годину студија уписала је на Физичком факултету, Универзитета у Београду школске 2000/2001. године, смер Теоријска и експериментална физика. Дипомирала је 2005. године и стекла звање дипломирани физичар са просечном оценом 9.07 у току студија.

Последипломске студије уписала је школске 2005/2006. године на Физичком факултету Универзитета у Београду из области Класична, квантна и нанофизика. Од 2005-2008. године била је стипендиста Министарства за науку и заштиту животне средине Републике Србије. Од 2016 године је на докторским студијама на Физичком факултету Универзитета у Београду на смеру Квантна, математичка и нанофизика.

Од 2008. до 2020. године била је запослена на Институту за физику. Од 2020. године запослена је на Институту за мултидисциплинарна истраживања на Одсеку за биљне, земљишне и нано-системе под руководством др Радомира Жикића.

## 1.2 Научна активност

Научно-истраживачки рад Иване Ђуришић се одвија на Институту за мултидисциплинарна истраживања Универзитета у Београду, на Одсеку за биљне, земљишне и нано-системе под менторством др Милоша Дражића, научног сарадника.

До сада, Ивана Ђуришић је објавила 4 рада у међународним часописима категорије M21, 2 рада у часописима категорије M22, 2 саопштења на међународним скуповима штампаних у изводу категорије M34, 1 рад у тематском зборнику међународног значаја категорије M14 и 1 рад у истакнутом националном часопису категорије M52.

Ивана Ђуришић је од 2009-2010. године била ангажована на међународном пројекту FP7-NMP „*Nano Tools for Ultra Fast DNA Sequencing*” под руководством др Радомира Жикића. Такође, учествовала је на пројекту Билатералне сарадње са Црном Гором, 2019-2021. године под називом „*Транспортне и термодинамичке особине нових материјала суперпроводник/ферромагнет хетероструктуре хетероструктуре*“. Учествовала је на следећим пројектима Министарства за науку и заштиту животне средине Републике Србије: „*Електронске, транспортне и оптичке особине нанофазних материјала*” (ОИ171033), 2011.-2019 године реализованом на Институту за физику под руководством др Радомира Жикића, „*Интегрална студија идентификације регионалних генетских фактора ризика и фактора ризика животне средине на масовне незаразне болести хумане популације у Србији- ИНГЕМА\_С*” (ИИИ41028), 2011-2019. године, под руководством др Драгана Алавантића.

## 2. Опис предатог рада

### 2.1. Основни подаци

Докторска дисертација Иване Ђуришић под насловом „*Електронски транспорт и ректификација трансверзалне електричне струје кроз ДНК нуклеотиде у нанопроцеду*” урађена је под менторством др Милоша Дражића, научног сарадника Института за мултидисциплинарна истраживања у Београду. Др Милош Дражић испуњава све услове за руковођење израдом докторске дисертације, те је на седници Наставно-научног већа Физичког факултета Универзитета у Београду одржаној 24.11. 2021, године именован за ментора ове докторске дисертације.

Тема докторске дисертације прихваћена је на Колегијуму докторских студија Физичког факултета одржаног 29. 09. 2021. године, а затим и на седници Наставно-научног већа Физичког факултета Универзитета у Београду која је одржана 27.10.2021. године. Веће научних области природно-математичких наука Универзитета у Београду је на седници одржаној 13. децембра 2021. године дало сагласност на предлог теме докторске дисертације.

## **2.2. Предмет и циљ докторског рада**

Предмет истраживања ове докторске дисертације је изучавање електронског транспорта кроз појединачне молекуле, са циљем проналаса ефикасног метода за ултра брзо секвенционирање ДНК. Пројекат декодирања само једног људског генома, започет 90-тих година коришћењем стандардне Сангерове методе, трајао је 13 година и коштао је 3 милијарде долара. Потреба за новим методама секвенционирања ДНК које омогућавају брзо и поуздано читање низа ланаца дужине целог хромозома, веома је важна за примену у здравству, посебно у персонализованој медицини, биотехнологији и безбедности, са могућим дубоким утицајем на цело друштво. Један од приступа, често примењиван од стране физичара је засновани на нанопорама. Нанопоре су се појавиле као обећавајућа платформа за секвенцирање ДНК и протеина, где варијација јонске струје током електрофоретичке транслокације једноланчане ДНК (јДНК) кроз нанопоре декодира нуклеотидну секвенцу. Упркос напретку, изазови у решавању читања дугих ланаца захтевају нове приступе. Једна од метода којом би могла да се повећа резолуција је да се наноелектроде поставе на ивице нанопора како би се искористила трансверзална електронска струја тунелирања кроз нуклеотид и унакрсно корелисала са јонском, ради поузданијег читавања.

Посебно су у овој дисертацији изучавана електронска и транспортна својства нуклеотида у нанопроцепу смештеног између електрода сачињених од угљеничних наноцеви чији су крајеви сатурирани азотом. Израчунате су струјно-напонске карактеристике методом неравнотежних Гринових функција добијене применом методом функционала густине. Откривено је да струја кроз нуклеотиде битно зависи од примењеног поларитета напона, односно да се неуклеотид између електрода понаша као диода. Такође, нађено је да ректификација битно зависи од врсте нуклеотида, као и то да оријентација молекула у нанопроцепу не утиче битно на ректификацију. На крају, мерење ректификације трансверзалне струје је предложено као нова метода за ултрабрзо секвенцирање.

## **2.3. Преглед научних резултата изложених у дисертацији**

Докторска дисертација Иване Ђуришић припада области нанофизике многочестичних система и састоји се од увода, пет поглавља, закључка и додакка. Увод и прва два поглавља представљају општи део, пре свега намењн упознавању читаоца са прегледом постојећих сазнања и методама истраживања. Поглавља 3, 4 и 5 представљају оригиналан допринос. У овим поглављима су пре свега описана два нова ефекта који су публиковани у међународним часописима:

1. Одговарајућом терминацијом крајева електрода (нанопоре) могуће је створити јако електрично поље између електрода чиме се значајно може утицати на транспортне особине система, слично раду ФЕТ транзистора.

2. Нађен је ефекат ректификације кроз ДНК нуклеотиде изазван прерасподелом наелектрисања унутар ДНК молекула. Такође, за разлику од јачине струје, ректификација је мање осетљива на положај молекула између електрода.

У првом поглављу приказани су принципи рада савремених метода секвенцирања, као и физичке карактеристике самог молекула ДНК и нуклеотида, који је основни предмет изучавања у овој докторској дисертацији. Такође, приказане су методе и њихови принципи засновани на нанопорама, као методи која је уско повезана са предметом изучавања у овој тези.

У другом поглављу приказане су теоријске и нумеричке методе коришћене у дисертацији за проучавање електронског транспорта кроз појединачне молекуле у зависности од примењеног напона. Поглавље је започето описом метода базираном на Гриновим функцијама, као најмоћнијем алату којим се у принципу могу у потпуности урачунати сви многочестични ефекти. Затим се наставља кратким описом потребних техника као што је теорија густине функционала, са приказом основа методе неравнотежних Гринових функција и њеном применом у *Landauer-Buttikerovom* разумевању квантног транспорта кроз мезоскопске и нано системе, као основном методологијом примењеном у овој дисертацији.

Треће поглавље представља оригиналан допринос, и као први корак у проучавању трансмисије кроз молекул смештеног између две наноелектроде, проучаване су особине електричног поља у нанопроцепу без молекула. Нађено је да се приликом терминације крајева електрода једноатомским врстама, може створити јако електрично поље унутар нанопроцепа. Посебно су проучавани ефекти изазвани терминацијом атомима азота, водоника, флуора, сумпора и хлора. Дато је физичко објашњење ове појаве, које се огледа пре свега у томе да се приликом терминације стварају диполи на крајевима електрода који онда генеришу електрично поље унутар нанопроцепа. Показано је да ово поље, слично ефекту рада ФЕТ транзистора, може померати молекуларне нивое тестираног молекула у процепу ближе, или даље од Ферми нивоа електрода на нултом напону. Односно, показано је да различити атоми у терминацији могу да спусте или да подигну енергију ХОМО нивоа молекула.

У четвртном поглављу је студирана промена енергије молекуларних нивоа молекула постављеног између електрода у нанопроцепу под утицајем примењеног напона. Објашњена је појава јаког пиновања (приликом промене напона ХОМО се не помера у одноцу на хемијски потенцијал), као последица редистрибуције наелектрисања у централном региону и слабог пиновања, као последица електростатичке потенцијалне енергије унутар нанопроцепа. Такође, иницијалним подизањем или спуштањем ХОМО/ЛУМО нивоа и приликом релативно малих напона (50mV) може доћи до ректификације. Дат је метод за процену понашања ХОМО/ЛУМО енергије молекула у нанопроцепу на коначном напону на основу вредности њихових енергија и просторне дистрибуције на нултом напону.

У петом поглављу је показано да за једноструки ланац ДНК постоји ректификација струје, па је ректификација разматрана као могући избор за детекцију

појединих ДНК нуклеотида између две електроде од N-терминисаних угљеничних нанотуба. Идентификовањем  $RR=I(-V)/I(V)$  (енгл. rectifying ratio) као поузданог параметра за секвенцирање једноструког ланца ДНК, мерење ректификације је и предложено као нови метод за секвенцирање. Овај метод је базиран на мерењу RR под утицајем квадратног пулса наизменичног напона V на којем ће RR давати најбољу дистинкцију између ДНК нуклеотида.

Сумирани резултати и закључци дисертације су представљени у поглављу Закључак, пре свега предлажући мерење ректификационог рача као новог метода за ултрабрзо секвенцирање.

У Додатку су представљени детаљи оригиналног доприноса изучавању утицаја врсте атома којим се врши терминација електрода на транспортне особине, као и проучавању доприноса молекулрних нивоа нуклеотида у трансмисији.

### 3. Списак публикација

Из ове докторске дисертације су проистекла **3** рада чији је укупан импакт фактор 104, од којих један припада категорији M21 (рад под редним бројем 1), а два категорији M22 (радови под редним бројевима 5 и 6). Уједно је **кандидаткиња и првопотписани коаутор на овим радовима**. Према бази Web of Science, радови кандидаткиње су цитирани укупно 13 пута, а њен h фактор је 2

#### *Радови у врхунским међународним часописима (M21)*

1. **I. Djurišić**, M. S. Dražić, A. Ž. Tomović, M. Spasenović, Ž. Šljivančanin, V. P. Jovanović, and R. Zikic, Field Effect and Local Gating in Nitrogen-Terminated Nanopores (NtNP) and Nanogaps (NtNG) in Graphene, *ChemPhysChem*, 22, 336-341 (2020). DOI: 10.1002/cphc.202000771; **IF(2019)=3.144**

2. **I. Djurišić**, V. P. Jovanović, M. S. Dražić, A. Ž. Tomović and R. Zikic, *Predicting Finite-Bias Tunneling Current Properties from Zero-Bias Features: The Frontier Orbital Bias Dependence at an Exemplar Case of DNA Nucleotides in a Nanogap*, *Nanomaterials*, 11 (11), (2021). DOI: 10.3390/nano11113021; **IF(2020)=5.076**

3. I. Popov, **I. Đurišić**, M. Belić, *Designing topological defects in 2D materials using scanning probe microscopy and a self-healing mechanism: A density functional-based molecular dynamics study*, *Nanotechnology*, 28 495706 (2017). DOI: 10.1088/1361-6528/aa9679; **IF(2017)=3,404**

4. A. Ž. Tomović, V. P. Jovanović, **I. Đurišić**, V. Z. Cerovski, B. Nastasijević, S. R. Veličković, K. Radulović, and R. Žikić, *Fast photoluminescence quenching in thin films of 4,4'-bis(2,2diphenylvinyl)-1,1'-biphenyl exposed to air*, *Journal of Luminescence*, 167, 204-210 (2015). DOI: 10.1016/j.jlum.2015.06.036; **IF(2014)=2.719**

**Радови у врхунским међународним часописима (M22)**

5. **I. Djurišić**, M. S. Dražić, A.Ž. Tomović, M. Spasenović, Željko Šljivančanin, V. P. Jovanović, R. Zikic, *DNA Sequencing with Single-Stranded DNA Rectification in a Nanogap Gated by N-Terminated Carbon Nanotube Electrodes*, **ACS Applied Nano Materials** 3, 3034-3043 (2020). DOI: 10.1021/acsnm.0c00385, **IF (2020)=5.097**

6. **I. Djurišić**, M. S. Dražić, A. Ž. Tomović, V. P. Jovanović, R. Zikic, *Electrostatically-driven energy shift of molecular orbitals of benzene and nicotine in carbon nanotube gaps*, *Journal of Nanoparticle Research* 23, 15 (8) (2021). DOI: 10.1007/s11051-021-05139-y; **IF(2019)=2.132**

**Саопштења са међународних скупова штампана у изводу (M34)**

7. A. Ž. Tomović, V. P. Jovanović, **I. Djurišić**, V. Z. Cerovski, B. Nastasijević, S. Veličković, K. Radulović, R. Žikić and V. I. Srdanov, *Degradation of thin 4,4'-bis(2,2'diphenyl vinyl)-1,1'biphenyl films by UV light*, XVI annual conference YUCOMAT 2014, Herceg Novi – Montenegro, September 1 – 5, 2014. Programme and the book of abstracts pp. 100.

8. Miloš S. Dražić, **Ivana Đurišić**, Viktor Z. Cerovski and Radomir Žikić, *The nonorthogonality effects on capacitive behaviour of quantum dot*, Serbian Ceramic Society Conference advanced ceramics and application V, 2016. Program and the Book of Abstracts, pp. 46.

**Монографска студија/поглавље у књизи M12 или рад у тематском зборнику међународног значаја (M14)**

9. Aleksandar Ž. Tomović, **Ivana Đurišić**, Radomir Žikić, Milan Pejić, Vladimir P. Jovanović, *Interaction of UV Irradiation with Thin Films of Organic Molecules*, Proceedings of the IV Advanced Ceramics and Applications Conference, B. Lee, R. Gadov, V. Mitic, Atlantis Press Paris (2017), ISBN 978-94-6239-212-0, pp. 317-347.

**Радови у истакнутим националним часописима (M52)**

10. Aleksandar Ž. Tomović, Vladimir P. Jovanović, **Ivana Đurišić**, Milan Pejić, Suzana Blesić i Radomir Žikić, *Mehanizam gašenja fotoluminescencije u tankim filmovima N,N'-bis(3methylphenyl)-N,N'-bis(phenyl)benzidine osvetljenih UV svetlošću u vazduhu*, *Tehnika* 70, 909914 (2015).

**4. Провера оригиналности докторске дисертације**

Извештај о оригиналности докторске дисертације ће бити накнадно достављен.

## 5. Закључак

На основу изложеног, Комисија закључује да резултати кандидаткиње **Иване Ђуришић** приказани у оквиру ове докторске дисертације представљају изузетно оригиналан и значајан научни допринос у области Квантне, математичке и нанофизике. Из области дисертације кандидаткиња је објавила 3 рада у међународним часописима, од тога један категорије M21 и два рада категорије M22 чији је укупан импакт фактор 10.37. Сходно томе, комисија предлаже Наставно-научном већу Физичког факултета Универзитета у Београду да одобри јавну одбрану њене докторске дисертације под насловом:

**Електронски транспорт и ректификација трансверзалне електричне струје кроз ДНК нуклеотиде у нанопроцепу**  
*(Electronic transport and rectification of transversal electric current through DNA nucleotides in a nanogap)*

У Београду, 21.1. 2022. године

---

**проф. др Горан Попарић**, Редовни професор  
Физички факултет у Београду,  
Универзитет у Београду

---

**проф. др Божидар Николић**, Ванредни професор  
Физички факултет у Београду,  
Универзитет у Београду

---

**др Жељко Шљиванчанин**, Научни саветник  
Институт за нуклеарне науке "Винча",  
Универзитет у Београду