

Наставно-научном већу Факултета за физичку хемију Универзитета у Београду

На IV редовној седници Наставно-научног већа Факултета за физичку хемију Универзитета у Београду, одржаној 18.01.2019. године, одређени смо за чланове Комисије ради спровођења поступка за стицање научног звања **научни сарадник** др Душана Димића.

На основу приложене и прикупљене документације о кандидату, биографских података и прегледа научно-истраживачког рада, а у складу са Законом о научно-истраживачкој делатности и Статутом Факултета за физичку хемију, подносимо следећи

ИЗВЕШТАЈ

А. Општи подаци о кандидату

Душан Димић је рођен 1990. године у Крагујевцу. Факултет за физичку хемију је уписао 2009. године и завршио 2013. године као студент генерације са просеком 10,00 и оценом 10 на дипломском раду под називом „Утицај микроталасног загревања на кинетику дехидратације хидрогелова“ (ментор др Боривој Аднађевић, редовни професор Факултета за физичку хемију). Мастер студије на Факултету за физичку хемију је завршио 2014. године са просеком 10,00 и оценом 10 на мастер раду под називом „Теоријска анализа арилхидразона као потенцијалних светлосних прекидача“ (ментор др Милена Петковић, ванредни професор Факултета за физичку хемију). Школске 2014/2015 је уписао докторске студије на матичном факултету и положио све испите предвиђене планом и програмом (просечна оцена 9,8). Докторску дисертацију под називом „Експериментално и теоријско испитивање односа структура-антирадикалска активност одабраних неуротрансмитера, њихових прекурсора и метаболита“, под менторством др Јасмине Димитрић-Марковић, редовног професора Факултета за физичку хемију, и др Зорана Марковића, редовног професора Департамана за хемијско-технолошке науке Државног универзитета у Новом Пазару, је одбранио 28.12.2018. године. Од 2014. године је запослен као истраживач приправник а од 1. јула 2015. године као асистент на Факултету за физичку хемију. Душан Димић је до сада држао вежбе из предмета Молекулска спектрохемија, Основи фотохемије, Форензичка физичка хемија, Физичка хемија 1 и Увод у лабораторијски рад. Укључен је у пројекте промоције науке и физичке хемије.

Област интересовања Душана Димића обухвата експериментално и теоријско испитивање антиоксидационе активности биолошки важних молекула (неуротрансмитера, полифенола и модификованих кумарина). Душана Димић је аутор једанаест радова штампаних у међународним часописима и двадесет радова штампаних у зборницима радова са конференција од међународног и националног значаја. Душана Димић се, током школске 2010/2011. године, као стипендиста Владе САД, усавршавао на Универзитету Минесота у Минеаполису. Практику је обављао на Вајцмановом институту у Израелу током 2012, у групи за археолошку хемију.

Кандидат је током 2014. године боравио два месеца на Истраживачком институту за теоријску и примењену физичку хемију у Ла Плати где се бавио развојем QSAR модела. Од јуна до септембра 2017. године Душан Димић је био гостујући истраживач на Институту Каролинска у Стокхолму где је боравио у лабораторији за флуоресцентну корелациону спектроскопију којом руководи ванредни професор др Владана Вукојевић. Кандидат је учествовао и у програму „Србија на вези“ током кога је сарађивао са др Драгославом Видовићем са Најџанг Техничког Универзитета у Сингапуру.

Душан Димић је током основних и мастер студије био стипендиста Министарства просвете, науке и технолошког развоја, Фонда „Доситеја“ Министарства омладине и спорта и Фондације „Студеница“. Добитник је награде Друштва физикохемичара Србије, Српског хемијског друштва и награде СУПЕРСТЕ Ерсте банке за успех на студијама и друштвени активизам.

Б. Библиографија

1. Магистарске и докторске тезе

1.1. Одбрањена докторска дисертација (M71)

*** 1 x 6 = 6**

„Експериментално и теоријско испитивање односа структура-антирадикалска активност одабраних неуротрансмитера, њихових прекурсора и метаболита“, Универзитет у Београду, Београд, 2018.

2. Радови објављени у научним часописима међународног значаја

2.1. Радови у међународном часопису изузетних вредности (M_{21a}=10)

*** 2 x 10 = 20**

2.1.1. **D. Dimić**, A. G. Mercader, E. A. Castro, “Chalcone derivatives cytotoxicity activity against MCF-7 human breast cancer cells QSAR study”, *Chemom. Intell. Lab. Syst.*, 2015, 146, 378-384, DOI: 10.1016/j.chemlab.2015.06.011. **(10 поена)**

2.1.2. N. Đorđević, M. Q. Y. Tay, S. Muthaiah, R. Ganguly, **D. Dimić**, D. Vidović, “C-F Bond Activation by Transient Phosphenium Dications“, *Inorg. Chem.*, 2015, 54 (9), 4180-4182, DOI: 10.1021/ic5031125. **(10 поена)**

2.2. Радови у врхунским међународним часописима (M₂₁=8)

*** 8/(1+0,2 x (10-7)) + 4 x 8 = 37**

2.2.1. E. Avdović, **D. Dimić**, J. Dimitrić Marković, N. Vuković, M. Radulović, M. Živanović, N. Filipović, J. Đorović, S. Trifunović, Z. Marković, “Spectroscopic and theoretical investigation of the potential anti-tumor and anti-microbial agent, 3-(1-((2-hydroxyphenyl)amino)ethylidene)chroman-2,4-dione“, *Spectrochim. Acta A*, 2019, 206, 421-429, DOI: 10.1016/j.saa.2018.08.034. **(5 поена)**

2.2.2. **D. Dimić**, D. Milenković, J. Ilić, B. Šmit, A. Amić, Z. Marković, J. Dimitrić Marković, “Experimental and theoretical elucidation of structural and antioxidant properties of vanillylmandelic acid and its carboxylate anion“, *Spectrochim. Acta A*, 2018, 198, 61-70, DOI: 10.1016/j.saa.2018.02.063. **(8 поена)**

2.2.3. **D. Dimić**, D. Milenković, J. Dimitrić Marković, Z. Marković, “Antiradical activity of catecholamines and metabolites of dopamine: theoretical and experimental study“, *Phys Chem Chem Phys*, 2017, 19, 12970-12980, DOI: 10.1039/c7cp01716b. **8 поена**

2.2.4. **D. Dimić**, M. Petković, “Control of a Photoswitching Chelator by Metal Ions: DFT, NBO, and QTAIM Analysis“, *Int J Quantum Chem*, 2016, 116 (1), 27-34, DOI: 10.1002/qua.25018. **(8 поена)**

2.2.5. C. Gurnani, N. Đorđević, S. Muthaiah, **D. Dimić**, R. Ganguly, M. Petković, D. Vidović, “Extending the chemistry of carbones: P-N bond cleavage via an S_N2'-like mechanism“, *Chem. Commun.*, 2015, 51, 10762-10764, DOI: 10.1039/C5CC03194J. **(8 поена)**

2.3. Радови у истакнутим међународним часописима (M₂₂=5)

*** 5/(1+0,2 x (4-3)) + 2 x 5 = 14,17**

2.3.1. **D. Dimić**, “The importance of specific solvent-solute interactions for studying UV-vis spectra of light-responsive molecular switches“, *C R Chim*, 21 (2018), 1001-1010, DOI: 10.1016/j.crci.2018.09.007. **(5 поена)**

2.3.2. **D. Dimić**, D. Milenković, J. Dimitrić Marković, Z. Marković, “Thermodynamic and kinetic analysis of the reaction between biological catecholamines and chlorinated methylperoxy radicals“, *Molecular Physics*, 2018, 116 (9), 1166-1178, DOI: 10.1080/00268976.2017.1414967. **(4,17 поена)**

2.3.3. **D. Dimić**, D. Milenković, Z. Marković, J. Dimitrić Marković, “Structural and Spectral Analysis of 3-methoxytyramine, an important metabolite of dopamine“, *J. Mol. Struct.*, 2017, 1134, 226-236, DOI: 10.1016/j.molstruc.2016.12.082. **(5 поена)**

2.4. Радови у међународним часописима ($M_{23}=3$)

$$* 3/(1+0,2 \times (8-3)) = 1,5$$

- 2.4.1. D. Milenković, E. H. Avdović, **D. Dimić**, Z. Bajin, B. Ristić, N. Vuković, S. Trifunović, Z. Marković, “ Reactivity of the coumarine derivative towards cartilage proteins: combined NBO, QTAIM, and molecular docking study“, *Monatsh Chem*, 2018, 149, 159-166, DOI: 10.1007/s00706-017-2051-4. (1,5 поен)

3. Зборници са међународних научних скупова

3.1. Саопштења са међународних скупова штампана у целини ($M_{33}=1$)

$$* 12 \times 1 = 12$$

- 3.1.1. **D. Dimić**, E. Avdović, S. Trifunović, I. Potočnak, J. Dimitrić Marković, Z. Marković, „Synthesis and crystallographic structure of novel coumarine derivative with dopamine“, 14th International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry, Belgrade, 24-28.09.2018, Book of Proceedings, 113-116. (1 поен)
- 3.1.2. A. Radović, **D. Dimić**, Đ. Nakarada, J. Dimitrić Marković, „EPR and theoretical investigation of hydroxy radical scavenging of selected catecholamines“, 14th International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry, Belgrade, 24-28.09.2018, Book of Proceedings, 479-482. (1 поен)
- 3.1.3. D. Sretenović, G. Jovanović, D. Milenković, E. Avdović, J. Đorović, **D. Dimić**, J. Dimitrić Marković, „The effect of additional OH group on the antiradical activity in dopamine/6-Ohdopamine and octopamine/norepinephrine pairs“, 14th International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry, Belgrade, 24-28.09.2018, Book of Proceedings, 575-578. (1 поен)
- 3.1.4. **D. Dimić**, D. Milenković, D. Amić, J. Dimitrić Marković, „Thermodynamic and Kinetic Aspects of the Electron-Transfer Reaction of Dopamine and its Metabolites Towards Substituted Methylperoxy Radicals“, 4th South-East European Conference on Computational Mechanics, Kragujevac, 3-4.7.2017., Book of Abstracts, 378-386. (1 поен)
- 3.1.5. M. Stanojević Pirković, S. Jeremić, J. Dimitrić Marković, **D. Dimić**, D. Amić, D. Milenković, „Computational Molecular Docking Studies of Kaempferol-Procalcitonin Interactions“, 4th South-East European Conference on Computational Mechanics, Kragujevac, 3-4.7.2017., Book of Abstracts, 387-392. (1 поен)
- 3.1.6. **D. Dimić**, D. Milenković, Z. Marković, J. Dimitrić Marković, „Theoretical study of the antioxidant activity of dopamine and its metabolites in water“, 13th International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry, Belgrade, 22-26.09.2016., Book of Proceedings, 431-434. (1 поен)

- 3.1.7. **D. Dimić**, D. Milenković, Z. Marković, J. Dimitrić Marković, „Conformational and vibrational analysis of 3-methoxytyramine“, 13th International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry, Belgrade, 22-26.09.2016., Book of Proceedings, 143-146. **(1 поен)**
- 3.1.8. D. Milenković, Z. Marković, S. Jeremić, **D. Dimić**, J. Dimitrić Marković, „Vibrational spectroscopic analysis of kaempferol: a comined experimental and theoretical study“, 13th International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry, Belgrade, 22-26.09.2016., Book of Proceedings, 131-134. **(1 поен)**
- 3.1.9. **D. Dimić**, M. Petković, „Stability and vibrational spectra of different complexes of Cu and Fe ions with (*E*)-*N'*-[1-(2-hidroxyphenyl)ethyliden]isonicotinoylhydrazide“, 12th International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry, Belgrade, 22-26.09.2014., Book of Proceedings, 1033-1036. **(1 поен)**
- 3.1.10. **D. Dimić**, „Explicit Solvent Effect as a Parameter Influencing the Electronic Transitions of the Novel Molecular Switch“, EWinS 2016: EUSpec Winter School on core level spectroscopies, Ajdovščina, 1-11.2.2016., Book of Abstracts, 57-58. **(1 поен)**
- 3.1.11. **D. Dimić**, M. Petković, „Theoretical analysis of Cu⁺ and Fe²⁺ complexes of (*E*)-*N'*-[1-(2-hidroxyphenyl)ethyliden]isonicotinoylhydrazide“, 12th International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry, Belgrade, 22-26.09.2014., Book of Proceedings, 176-179. **(1 поен)**
- 3.1.12. **D. Dimić**, B. Adnađević, J. Jovanović, „Kinetics of osmotic drying of alginate beads“, 11th International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry, Belgrade, 24-28.9.2012., Book of Proceedings, 197-199. **(1 поен)**

3.2. Саопштења са међународних скупова штампана у целини (M₃₄=0,5)

*** 2 x 0,5= 1**

- 3.2.1. J. Ilić, D. Dimić, J. Dimitrić Marković, “Structural analysis of antiradical activities of catecholamines”, in: 17th Young Researchers Conference – Material Science and Engineering, Beograd, 5-7.12.2018., Book of Abstracts, 8. **(0,5 поена)**
- 3.2.2. D. Dimić, M. Petković, „Photoisomerisation mechanism of novel molecular switches – a Theoretical Investigation“, 13th Young Researchers’ Conference, Belgrade, 10-12.12.2014., Book of Abstracts, 22. **(0,5 поена)**

4. Предавања по позиву на скуповима националног значаја

4.1. Саопштења са скупова националног значаја штампана у изводу (M₆₄=0,2)

*** 0,2/(1-0,2 x (8-7)) + 6 x 0,2 = 1,36**

- 4.1.1. A. Radović, **D. Dimić**, Đ. Nakarada, J. Dimitrić Marković, “Antioxidant and pro-oxidant properties of catecholamines and their metabolites towards hydroxyl radical”,

- in: Šesta konferencija mladih hemičara Srbije, Beograd, 27.10.2018., Book of Abstracts, 9. **(0,2 поена)**
- 4.1.2. D. Sretenović, **D. Dimić**, J. Dimitrić-Marković, “Theoretical and spectral analysis of 6-hydroxydopamine”, in: Šesta konferencija mladih hemičara Srbije, Beograd, 27.10.2018., Book of Abstracts, 111. **(0,2 поена)**
- 4.1.3. E. Avodvić, J. Đorović, D. Milenković, Ž. Milanović, **D. Dimić**, J. Dimitrić Marković, Lj. Joksović, A. Amić, Antioksidativna aktivnost odabranih triazola, Drugi Kongres Biologa Srbije: osnovna i primenjena istraživanja, metodika nastave, Kladovo, 25-30.09.2018., Knjiga sažetaka, 24. **(0,16 поена)**
- 4.1.4. **D. Dimić**, D. Milenković, Z. Marković, J. Dimitrić Marković, „The mechanistic approach in the antiradical activity investigation of dopamine, epinephrine and norepinephrine towards DPPH”, Četvrta konferencija Mladih hemičara Srbije, Beograd, 5.11.2016., Book of Abstracts, 97. **(0,2 поена)**
- 4.1.5. **D. Dimić**, M. Petković, „Investigation of the influence of solvent molecules on the electronic transition of the molecular switch HAPI”, Treća konferencija Mladih hemičara Srbije, Beograd, 24.10.2015., Book of Abstracts, 91. **(0,2 поена)**
- 4.1.6. **D. Dimić**, M. Petković, „Theoretical analysis of (*E* and *Z*)-*N*'-[1-(2-hidroxyphenyl)ethyliden] isonicotinoylhydrazide) solvation”, Druga konferencija Mladih hemičara Srbije, Niš, 5-7.06.2014., Book of Abstracts, 148. **(0,2 поена)**
- 4.1.7. **D. Dimić**, B. Adnađević, J. Jovanović, „Kinetics of osmotic drying of alginate beads“, Prva konferencija Mladih hemičara Srbije, Beograd, 19-20.10.2012., Book of Abstracts, 91. **(0,2 поена)**

На основу критеријума за процену научне компетентности кандидата у групацији природно-математичких наука, кандидат је остварио следеће квантитативно изражене резултате:

Укупно: $M = 93,03$ (за научног сарадника потребно 16)

$M10 + M20 + M31 + M32 + M33 + M41 + M42 = 84,67$

(за научног сарадника потребно 10)

$M11 + M12 + M21 + M22 + M23 + M24 = 72,67$

(за научног сарадника потребно 6).

В. Квалитативна оцена научног доприноса

1. Показатељи успеха у научном раду

Успех научно-истраживачког рада кандидата се огледа у броју објављених радова у међународним часописима. Од 11 објављених радова два су објављена у међународним часописима изузених вредности а пет у врхунским међународним часописима. Кандидат је први аутор на 7 радова. Кандидат је урадио две рецензије за часопис *Journal of Molecular Modeling* и две рецензије саопштења на 14th International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry.

Душан Димић је од 2014. године члан Друштва физикохемичара Србије и Српског хемијског друштва. Добитник је специјалних признања Друштва физикохемичара Србије и Српског хемијског друштва за успех на основним студијама.

Душан Димић је био члан извршног одбора две међународне конференције: 13th International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry (Београд, 26-30.9.2018. године) и 14th International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry (Београд, 24-28.9.2018. године).

2. Ангажованост у развоју услова за научни рад, образовању и формирању научних кадрова

У оквиру свог рада кандидат се на почетку бавио спектроскопским и теоријским испитивањем метаболита неуротрансмитера за које у литератури не постоји детаљна анализа структуре и спектра. Комбиновањем експерименталних (инфра-црвена, раманска, НМР и електронска спектроскопија) и теоријских (DFT) метода су асигнирани спектри и одређени најстабилнији конформери испитиваних једињења.

Део истраживања кандидата је укључивао *in vitro* одређивање антирадикалске активности групе од 15 једињења која укључују неуротрансмитере (допамин, епинефрин, норепинефрин), њихове прекурсоре (тирозин, L-DOPA, тирамин, фенилаланин и фенилетиламин) и метаболите (3-метокситирамин, октопамин, ванилилбадемову киселину, 6-хидроксидопамин, хомованилинску киселину, 3,4-дихидроксифенил сирћетну киселину и катехол). ЕПР спектроскопијом је одређивана активност према хидрокси-радикалу, аскорбил-радикалу и DPPH радикалу, док је цикличном волтаметријом испитана активност према супероксид радикал-анјону. У овим истраживањима је посебно анализиран утицај структурних параметара на реактивност. Теоријски прорачуни су урађени како би се одредили термодинамички (промена енталпије и Гибсове слободне енергије реакција) и кинетички (константе брзина) реакција.

Поред молекула који су природно присутни у организму, област интересовања кандидата обухвата и новосинтетисане молекуле, деривате кумарина са

неуротрансмитерима и њиховим метаболитима. Поред спекроскопске, кристалографске и теоријске анализе структуре и спектра ових молекула испитују се и антитуморска и микробиолошка активност.

Због комбинације експерименталног и теоријског рада кандидат је у могућности да испита и одреди најповољнији механизам хемијских реакција, хемијску и биохемијску активност, појединачних делова молекула, интер- и интрамолекуларне интеракције, интеракције са протеинима и добро опише кристалографску структуру. Због тога његов рад у поменутих областима представља значајан научни допринос.

Кандидат је до сада учествовао у изради пет дипломских и четири мастер рада. Сви радови су укључивали експериментално-теоријски приступ проблематици и оцењени су највишим оценама. Душан Димић је запослен као асистент на Факултету за физичку хемију где држи вежбе из предмета Молекулска спектрохемија, Основи фотохемије, Увод у лабораторијски рад, Форензичка физичка хемија, Физичка хемија за студенте Хемијског факултета на основним студијама и Увод у форензику на специјалистичким струковним студијама форензике.

Душан Димић активно учествује у популаризацији науке и физичке хемије кроз пројекте „Наука око нас“, „Фестивал науке“, „Ноћ истраживача“ и сајам образовања „Звонце“. Учествовао је такође и у реализацији припремне наставе и организацији пријемних испита на Факултету за физичку хемију.

3. Организација научног рада

Душан је од 2014. године учесник у научном пројекту Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије „Структура и динамика молекулских система у основним и побуђеним стањима“ (ОИ 172040), чији је руководилац др Михајло Етински, ванредни професор Факултета за физичку хемију. Кандидат је током три месеца 2017. године (јун-септембар) био гостујући истраживач на Институту Каролинска у Стокхолму у оквиру ERASMUS Plus програма. Током овог периода радио је експерименте у лабораторији за флуоресцентну коорелациону спектроскопију којом руководи др Владана Вукојевић, ванредни професор Департмана за клиничке неуронауке Каролинска Института у Стокхолму.

4. Квалитет научних резултата

Кандидат је до сада објавио 11 радова у међународним часописима, од тога 2 у међународним часописима изузетних вредности, 5 у врхунским међународним часописима, 3 у истакнутим међународним часописима и 1 у међународном часопису. Поред тога има и 12 саопштења са међународних скупова штампана у целини, 2 саопштења са међународних скупова штампана у изводу и 6 саопштења са скупова од

националног значаја. Кандидат је први аутор на 7 радова. Резултати кандидата су у литератури цитирани 34 пута од чега 22 пута од стране других аутора (према индексној бази Scopus, на дан 14.1.2019. године). Резултати су према бази Google Scholar цитирани 44 пута (на дан 14.1.2019. године). Према обе индексне базе вредност h индекса износи 4.

Г. Кратак преглед радова

У раду 2.1.1. је примењена Квантитативна анализа структура-активност (Quantitative Structure-Activity Relationship – QSAR) халкона и њихових деривата како би се одредили дескриптори који се могу корелисати са активношћу ових молекула према MCF-7 ћелијама рака дојке. Сет састављен од 93 молекулске структуре је испитан Enhanced Replacement Method – ERM која сукцесивно замењује чланове скупа и прати промене у корелацији дескриптора и експерименталних величина. Најбољи модели су садржали само дводимензионе дескрипторе. На основу примењеног метода добијен је модел са пет дескриптора који на интуитиван начин описују активност молекула према поменутој ћелијској линији. Посебна предност модела је то што не садржи тродимензионалне дескрипторе тако да није потребна детаљна оптимизација структуре.

У раду 2.1.2. је показано раскидање C-F везе коришћењем дикатјона који садрже фосфор(III) $[RP(C(PPh_3)_2)]^{2+}$ (R=Ph, 4-F-Ph). На основу теоријске анализе је закључено да је најнижа непопуњена орбитала ових једињења заслужна за активацију C-F везе.

Рад 2.2.1. приказује спектроскопску и теоријску анализу структуре 3-(1-((2-хидоксифенил)амино)етилиден)хроман-2,4-диона, деривата кумарина и аминоксанола. Реактивност датог једињења је испитана NBO, QTAIM и методом молекулског докинга. Експериментално је утврђено да постоји активност према испитиваним врстама бактерија и гљива. Значајан цитотоксични ефекат је примећен према НСТ-116 ћелијама.

У раду 2.2.2. је детаљно описана структура и антирадикалска активност ванилилбадемове киселине, важног метаболита неуротрансмитера. Различите експерименталне методе (електронска, инфрацрвена, раманска и НМР спектроскопија) су искоришћене за описивање структуре. Теоријски спектри добијени на M062X/6-311++G(d,p) нивоу теорије су искоришћени за поређење са експерименталним подацима. На основу коефицијента корелације и средње апсолутне разлике је закључено да овај ниво теорије добро описује експерименталну структуру. Посебно је испитана разлика од 50 nm у електронском спектру која је поседица специфичних интеракција са растварачем. У овом раду је одређен и термодинамички најповољнији механизам реакција са слободним радикалима на основу рачунања енталпија реакција.

Рад 2.2.3. приказује детаљну анализу структурних параметара који су одговорни за антирадикалску активност катехоламина, њихових прекурсора и метаболита. Експериментална активност је испитана према DPPH радикалу. На основу

термодинамичких параметара је одређен највероватнији механизам реакција. Детаљно је продискутована разлика између механизма преноса атома водоника (Hydrogen Atom Transfer - HAT) и спрегнутог преноса протона и електрона (Coupled Proton-Electron Transfer) на основу анализе SOMO (singly occupied molecular orbital) орбитале, промене наелектрисања и спинске густине и структуре прелазног стања реакције са DPPH радикалом. Израчунавањем термодинамичких параметара и константи брзина процеса закључено је да је пренос протона праћен преносом електрона (Sequential Proton Loss Electron Transfer - SPLET) доминантан механизам катехоламина према овом радикалу.

На основу експерименталних података о структури и стабилности комплекса метала са N'-[1-(2-хидрокифенил)етилиден]изо-никотиноил-хидразидом (ХАПИ), у раду 2.2.4. су теоријски испитани комплекси са K^+ , Ca^{2+} , Mn^{2+} , Fe^{2+} , Fe^{3+} , Cu^+ , Cu^{2+} и Zn^{2+} јонима. Најзначајнији параметри за стабилност комплекса су јонски радијус и наелектрисање пренето са лиганда на метални јон: мањи радијус и већа вредност пренетог наелектрисања карактеришу стабилније комплексе.

У раду 2.2.5. је описана реактивност карбодифосфоборана и карбодикарбена према различитим дихлорофосфинима. У већини случајева је уочена замена карбонских лиганда хлором. Примена $MeN(PCl_2)_2$ је довела до јединственог раскидања P-N везе. Теоријски је показано да се ова реакција дешава према S_N2' механизму.

У раду 2.3.1. је испитан значај специфичних расворак-расварач интеракција за симулацију теоријских електронских спектра, а на примеру N'-[1-(2-хидрокифенил)етилиден]изо-никотиноил-хидразидом (ХАПИ), молекулског прекидача. Применом теорије функционала густине, NBO и QTAIM метода су описане интеракције између молекула воде и ХАПИ-ја. Резултати показују да правилно постављени молекули растварача смањују број молекула који је потребан за правилно описивање интеракција.

Антирадикалска активност катехоламина, њихових прекурсора и метаболита према хлорованим метилперокси-радикалима је приказана у раду 2.3.2. На основу термодинамичких параметара је добијен најповољнији механизам, са посебном пажњом на утицај броја хлорових атома на вредности термодинамичких параметара. Резултати показују да је SPLET механизам доминантан у случају метилперокси-радикала и да се постепено мења до HAT механизма са повећањем броја хлорових атома.

У раду 2.3.3. су описане спектроскопске и структурне особине 3-метокситирамина, важног метаболита допамина. Прорачуни на бази теорије функционала густине, на B3LYP/6-311++G(d,p) нивоу теорије, су искоришћени за симулацију електронских, инфрацрвених, раманских и НМР спектра који су упоређени са експерименталним подацима. Показано је да овај ниво теорије добро репродукује структуру и спектре 3-метокситирамина. Посебно су продискутоване интермолекулске

интеракције које стабилизују структуру. Методом молекулског докинга су одређени типови интеракција између протеина и испитиваних молекула.

Реактивност кумаринског деривата према протеинима хрскавице је описана у раду 2.4.1. На основу NBO, QTAIM и молекулског докинга су одређена места електрофилног, нуклеофилног и радикалног напада у структури и показано је да се Фукуи функције могу користити као дескриптори реактивности за нове молекуле.

Оцена комисије о научном доприносу кандидата са образложењем

На основу приложене и прикупљене документације о кандидату, биографских података и прегледа научно-истраживачког рада, Комисија закључује да кандидат др Душан Димић, доктор физичкохемијских наука, запослен као асистент на Факултету за физичку хемију, поред одбрањене докторске дисертације има: 11 радова у међународним часописима (од тога 2 рада у међународним часописима изузетних вредности категорије M21a, 5 радова у врхунским међународним часописима категорије M21, 3 рада у истакнутим међународним часописима категорије M22 и 1 рад у међународном часопису категорије M23), као и 14 саопштења на међународним конференцијама (од којих су 12 штампана у целини и 2 штампана у изводу) и 6 саопштења на конференцијама националног значаја штампаних у изводу. Резултати др Душана Димића су цитирани у научној литератури 34 пута, од тога 22 пута од стране других аутора (према индексној бази Scopus). Према наведеним резултатима, а познајући рад кандидата, Комисија закључује да је др Душан Димић у области физичкохемијских наука остварио резултате који га, у складу са Правилником о поступку и начину вредновања и квантитативном исказивању научно-истраживачких резултата истраживача Националног савета за научни и технолошки развој Републике Србије, квалификују за избор у звање научни сарадник. Стога, Комисија сматра да су испуњени сви услови на основу којих Наставно-научно веће Факултета за физичку хемију Универзитета у Београду може да утврди предлог за избор **др Душана Димића у звање научни сарадник.**

У Београду, 1.2.2019. године

Комисија:

др Јасмина Димитрић-Марковић, редовни професор
Факултет за физичку хемију, Универзитет у Београду

др Никола Цвјетићанин, редовни професор
Факултет за физичку хемију, Универзитет у Београду

др Милош Мојовић, ванредовни професор
Факултет за физичку хемију, Универзитет у Београду

др Биљана Шљукић-Паунковић, ванредовни професор
Факултет за физичку хемију, Универзитет у Београду

др Зоран Марковић, редовни професор
Департаман за хемијско-технолошке науке, Државни универзитет у Новом Пазару