

Nastavno-naučnom veću Fakulteta za fizičku hemiju Univerziteta u Beogradu

Na II redovnoj sednici Nastavno-naučnog veća Fakulteta za fizičku hemiju Univerziteta u Beogradu održanoj 09.11.2017. godine određeni smo za članove Komisije radi sprovođenja postupka za sticanje istraživačkog zvanja istraživač-saradnik master fizikohemičara Đure Nakarade.

Na osnovu priložene i prikupljene dokumentacije o kandidatu, biografskih podataka i pregleda naučno-istraživačkog rada, a u skladu sa Zakonom o naučno-istraživačkoj delatnosti i Statutom Fakulteta za fizičku hemiju, podnosimo sledeći

IZVEŠTAJ

A. Opšti podaci o kandidatu

Đura Nakarada je rođen 23.03.1987. godine u Pančevu. Osnovnu i srednju školu završio je u Pančevu. Diplomirao je 2012. godine na Hemijskom fakultetu, i odbranom diplomskog rada „*Ispitivanje elektrohemijskog ponašanja kompleksa bakra (II) sa tetradentatnim Šifovim bazama*“, stekao zvanje diplomirani hemičar. Master studije na Fakultetu za fizičku hemiju završio je 2013. godine odbranom master rada „*Hemijski sastav i anti-hidroksil radikalska aktivnost isparljivih komponenti slatkovodne briozoe Hyalinella punctata*“. Novembra 2013. je upisao doktorske studije na Fakultetu za fizičku hemiju. Veće naučnih oblasti prirodnih nauka Univerziteta u Beogradu dalo je 26.05.2016. saglasnost na predlog teme doktorske disertacije Đure Nakarade pod nazivom „*Antiradikalska aktivnost avarola: teorijski i eksperimentalni pristup*“. Od 1.12.2016. zaposlen je kao istraživač-pripravnik na Fakultetu za fizičku hemiju na projektu III41005 Ministarstva prosvete, nauke i tehnološkog razvoja Republike Srbije „*Biomarkeri u neurodegenerativnim i malignim procesima*“.

Dobitnik je pohvalnice prestolonaslednika Aleksandra II Karađorđevića kao đak generacije (2006). Član je Kluba mladih hemičara pri Srpskom hemijskom društvu (2011) i Srpskog društva za mitohondrijalnu i slobodno-radikalsku fiziologiju (2013).

Đura Nakarada je objavio četiri rada i osam saopštenja na naučnim skupovima.

Naučno-istraživački rezultati

B. Bibliografija

1. Magistarske i doktorske teze

Odbranjen master rad (M₇₂)

„Hemijski sastav i anti-hidroksil radikalska aktivnost isparljivih komponenti slatkovodne briozone *Hyalinella punctata*“, Fakultet za fizičku hemiju, Univerzitet u Beogradu, 2013.

2. Radovi u vrhunskim međunarodnim časopisima (M₂₁)

1. **Đ. Nakarada**, M. Petković, *Mechanistic insights on how hydroquinone disarms OH and OOH radicals*, International Journal of Quantum Chemistry, 2017, doi: 10.1002/qua.25496
2. **Đ. Nakarada**, M. Etinski, M. Petković, *Using density functional theory to study neutral and ionized stacked thymine dimers*, The journal of physical chemistry A, 2016, 120, 7704–7713.

3. Radovi u istaknutim međunarodnim časopisima (M₂₂)

1. I. Cvijetić, M. Vitorović-Todorović, I. Juranić, **Đ. Nakarada**, M. Milosavljević, B. Drakulić, *Reactivity of (E)-4-aryl-4-oxo-2-butenic acid phenylamides with piperidine and benzylamine: kinetic and theoretical study*, Monatshefte für chemie – Chemical monthly, 2014, 145 (8), 1297–1306.

4. Radovi u međunarodnim časopisima (M₂₃)

1. Pejcin, **Đ. Nakarada**, M. Novaković, V. Tešević, A. Savić, K. Radotić, M. Mojović, *Antioxidant volatiles of the freshwater bryozoan Hyalinella punctata*, Natural product research, 2014, 28 (18), 1471–1475.

5. Saopštenja sa međunarodnih skupova štampana u izvodu (M₃₄)

1. **Đ. Nakarada**, M. Petković, C. Iodice, G. Tommonaro, B. Pejcin, *A computational insight into antiradical activity of the marine natural product avarol*, 3rd Congress of the Serbian Society for mitochondrial and free radical physiology, Belgrade, Serbia, September 2015, 44.
2. I. Petrešević, B. Pejcin, **Đ. Nakarada**, N. Đorđević, V. Tešević, M. Mojović, J. Dimitrić-Marković, *The correlation between total polyphenolic content and anti-DPPH radical*

activity of selected Vranac red wine samples, 3rd Congress of the Serbian Society for mitochondrial and free radical physiology, Belgrade, Serbia, September 2015, 45.

3. B. Pejin, **Đ. Nakarada**, T. Obradović, M. Sabovljević, Lj. Vujisić, M. Mojović, J. Dimitrić-Marković, *The moss Rhodobryum ontariense volatiles may inspire new therapies in the treatment of hearth diseases including hypertension*, 2nd International conference on plant biology, 21st symposium of the Serbian plant physiology Society, Petnica, Serbia, June 2015, 84.
4. B. Pejin, **Đ. Nakarada**, M. Sabovljević, Lj. Vujisić, V. Tešević, V. Vajs, *Thapsic acid, a rarely found natural product among bryophyte species*, 2nd International conference on plant biology, 21st symposium of the Serbian plant physiology Society, Petnica, Serbia, June 2015, 98.
5. B. Pejin, **Đ. Nakarada**, M. Lazović, A. Savić, M. Mojović, *In vitro anti-hydroxyl radical activity of the sesquiterpenoid hydroquinone avarol using electron paramagnetic resonance spectroscopy*, 5th CASEE Conference: "Healthy food production and environmental preservation – the role of agriculture, forestry and applied biology", Novi Sad, Serbia, May 2014, 52–53.
6. B. Pejin, **Đ. Nakarada**, M. Novaković, A. Savić, V. Tešević, A. Hegediš, I. Karaman, M. Horvatović, K. Radotić, M. Mojović, *Anti-hydroxyl radical activity of volatile natural products of the freshwater bryozoan Hyalinella punctata (Hancock 1850) – 8th International conference of the chemical societies of the South-East European countries*, Belgrade, Serbia, June 2013, 84.

6. Saopštenja na skupovima nacionalnog značaja, štampana u celini (M₆₃)

1. I. Cvijetić, M. Vitorović-Todorović, I. Juranić, **Đ. Nakarada**, M. Radulović, B. Drakulić, *Kinetic and mechanism of the addition of piperidine and benzylamine to the aroylacrilic acid phenylamides – 49th Meeting of the Serbian crystallographic Society*, Kragujevac, Serbia, May 2011, 167–171.

7. Saopštenja na skupovima nacionalnog značaja, štampana u izvodu (M₆₄)

1. Б. Пејин, **Ђ. Накарада**, М. Новаковић, С. Горјановић, Ф. Пастор, М. Мојовић, А. Савић, В. Тешевић, А. Хегедиш, И. Караман, М. Хорватовић, К. Радотић, Д. Сужњевић, *Антиоксидативна активност испарљивих компоненти Hyalinella punctata одређена поларографијом са једносмерном струјом користећи анодни талас водоник-пероксида*, Други конгрес Српског друштва за митохондријалну и слободно-радикалску физиологију, Књига сажетака, Ниш, Србија, септембар 2013, 50.

C. Kvalitativna ocena naučnog doprinosa

1. Pokazatelji uspeha u naučnom radu

Đura Nakarada je zaposlen na projektu Ministarstva prosvete, nauke i tehnološkog razvoja Republike Srbije III41005 od decembra 2016. godine i do sada je publikovao dva rada u vrhunskim međunarodnim časopisima (M_{21}) u kojima je prvi autor, jedan rad u istaknutom međunarodnom časopisu (M_{22}), jedan rad u međunarodnom časopisu (M_{23}) i osam saopštenja na konferencijama. U okviru svog dosadašnjeg rada, Đura Nakarada se detaljno upoznao sa primenom EPR spektroskopije, računarskom obradom podataka, optimizacijom stabilnih molekulskih struktura i prelaznih stanja programskim paketom Gaussian, obradom i interpretacijom rezultata programskim paketom AIMAll, pregledom literature i pisanjem naučnih radova.

2. Angažovanost u razvoju uslova za naučni rad, obrazovanju i formiranju naučnih kadrova:

Đura Nakarada ne učestvuje direktno u izvođenju nastave i vežbi na Fakultetu za fizičku hemiju, ali pruža pomoć kolegama na projektu i studentima pri izradi diplomskih i master radova iz naučne oblasti kojom se bavi.

Kandidat je učestvovao u organizaciji godišnjeg naučnog skupa *Raman4Clinics* održanog u Beogradu 6.-7.07.2017.

3. Organizacija naučnog rada

Kandidat je od 2016. istraživač na naučnom projektu Ministarstva prosvete, nauke i tehnološkog razvoja Republike Srbije III41005 na kome se bavi proučavanjem biomarkera za maligne i neurodegenerativne procese.

4. Kvalitet naučnih rezultata:

Radovi Đure Nakarade su do novembra 2017. godine, prema Google Scholar-u, citirani četiri puta, od čega je jedan autocitat. Prema Scopus-u, radovi kandidata su citirani dva puta, od čega je jedan autocitat.

D. Kratak prikaz radova

1. U radu „*Mechanistic insights on how hydroquinone disarms OH and OOH radicals*“, detaljno su analizirane reakcije apstrakcije atoma vodonika iz hidroksilne grupe hidrohina od strane hidroksil i hidroperoksil radikala. Pomoću kvantne teorije atoma u molekulima (QTAIM) proučavana su odabrana svojstva tri ključna atoma (atoma donora, atoma akceptora i atoma vodonika koji se prenosi) duž puta minimalne energije. Na osnovu dobijenih rezultata može se zaključiti da su obe reakcije primeri spregnutog kretanja protona i elektrona, koji istovremeno prelaze na atom kiseonika radikala. Ustanovljeno je i da prisustvo rastvarača nema uticaj na redosled prenosa elektrona i protona u posmatranim sistemima.
2. U radu „*Using density functional theory to study neutral and ionized stacked thymine dimers*“, izučavane su steking interakcije dimera timina primenom teorije funkcionala gustine. Na osnovu proračuna, ustanovljeno je da na niskim temperaturama može da se nagradi šest dimera uporedive stabilnosti, dok na sobnoj temperaturi ne dolazi do dimerizacije. Strukture neutralnih i jonizovanih vrsta analizirane su pomoću kvantne teorije atoma u molekulima (QTAIM). Identifikovane su kritične tačke veza, prstenova i kaveza u prostoru između dva monomera. Steking interakcije utiču i na vertikalne i adijabatske energije jonizacije, za koje je proračunima ustanovljeno da su kod dimera nešto niže u odnosu na monomer.
3. U radu „*Reactivity of (E)-4-aryl-4-oxo-2-butenic acid phenylamides with piperidine and benzylamine: kinetic and theoretical study*“, primenom UV/Vis spektrofotometrije određene su konstante brzine hemijske reakcije adicije deprotonovanog piperidina i benzilamina na kongenernu seriju fenilamida aroilakrilnih kiselina u metanolu. Uticaj supstituenata na konstantu brzine reakcije kvantifikovan je pomoću Hametovih konstanti supstituenata i naelektrisanja izračunatih DFT metodom za elektrofilni ugljenikov atom. 2D NMR tehnikom potvrđena je regioselektivnost reakcije. Ustanovljeno je da postoji zadovoljavajuća korelacija između konstanti brzine reakcija drugog reda i Hametovih konstanti supstituenata, kao i između teorijskih i eksperimentalnih UV/Vis spektara kiselina i njihovih adukata.
4. U radu „*Antioxidant volatiles of the freshwater bryozoan Hyalinella punctata*“, opisano je kako su destilacijom vodenom parom, iz dva uzorka slatkovodne briozoe *Hyalinella punctata* izolovane lako isparljive komponente. Njihov sastav ispitan je gasnom hromatografijom i masenom spektrometrijom. EPR tehnikom, u *in vitro* uslovima, testirana je njihova anti-hidroksil radikalska aktivnost. Uzorci su sadržali relativno slične glavne komponente. EPR merenjima ustanovljeno je da oba uzorka poseduju značajnu anti-hidroksil radikalsku aktivnost ($75.00 \pm 6.00\%$, odnosno $87.00 \pm 8.00\%$, respektivno).

E. Ocena komisije o naučnom doprinosu kandidata sa obrazloženjem:

Kandidat Đura Nakarada, master fizikohemičar, zaposlen na Fakultetu za fizičku hemiju kao istraživač-pripravnik, pokazao je u svom dosadašnjem naučno-istraživačkom radu veliku kreativnost, upornost i sposobnost za rešavanje naučno-istraživačkih zadataka. Sposoban je da samostalno planira i izvodi eksperimente koji uključuju snimanja na uređajima za elektron paramagnetnu rezonancu (L-band) i UV-VIS spektrofotometriju, optimizacije stabilnih molekulskih struktura i prelaznih stanja programskim paketom Gaussian, kao i obradu podataka i očitavanje parametara od značaja programskim paketom AIMAll. Objavio je dva rada u vrhunskim međunarodnim časopisima (M₂₁) u kojima je prvi autor, jedan rad u istaknutom međunarodnom časopisu (M₂₂), jedan rad u međunarodnom časopisu (M₂₃), kao i šest saopštenja na naučnim skupovima od međunarodnog značaja štampanih u izvodu (M₃₄), jedno saopštenje na skupu nacionalnog značaja, štampano u celini (M63) i jedno saopštenje na skupu nacionalnog značaja, štampano u izvodu (M64).

Na osnovu svih rezultata i objavljenih radova, članovi komisije predlažu Nastavno-naučnom veću Fakulteta za fizičku hemiju da prihvati ovaj izveštaj i izabere Đuru Nakaradu u zvanje **istraživač saradnik**.

Beograd, 27.11.2017.

Članovi komisije:

dr Miloš Mojović, vanredni profesor
Fakulteta za fizičku hemiju Univerziteta u Beogradu

dr Milena Petković, vanredni profesor
Fakulteta za fizičku hemiju Univerziteta u Beogradu

dr Ana Popović-Bijelić, docent
Fakulteta za fizičku hemiju Univerziteta u Beogradu