

НАСТАВНО-НАУЧНОМ ВЕЋУ ФАКУЛТЕТА ЗА ФИЗИЧКУ ХЕМИЈУ

На IV редовној седници Наставно-научног већа Факултета за физичку хемију Универзитета у Београду, одржаној 18.1.2018. године, одређени смо за чланове Комисије ради спровођења поступка за стицање научног звања **научни сарадник др Бранислава Станковића**.

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

ИЗВЕШТАЈ

А. Општи подаци о кандидату

Бранислав Станковић је рођен 20.12.1990. у Лесковцу. Основну школу “8 октобар“ завршио је у Власотинцу, а Гимназију “Светозар Марковић“ у Нишу. Основне студије на Факултету за физичку хемију Универзитета у Београду уписао је академске 2008/9. године и дипломирао 2012. године (просечна оцена 10,00). Диломски рад “Симулација динамике Bray-Liebhafsky реакције у отвореном реактору” одбранио је са оценом 10. Мастер студије на Факултету за физичку хемију Универзитета у Београду уписао је 2012/13. године и завршио 2013. године (просечна оцена 10,00). Мастер рад под називом “Трансформација суперкритичне у супкритичну Андроноу-Хопфову бифуркацију” је одбранио са оценом 10. Докторске студије на Факултету за физичку хемију Универзитета у Београду уписао је 2013/14. године. Докторску дисертацију под називом “Примена метода дисперзне кинетике у проучавању кинетике одабраних физичкохемијских процеса и хемијских реакција у чврстом стању“ одбранио је 29.9.2017. године.

На Факултету за физичку хемију запослен је као истраживач на пројекту (Пројект бр. 172015 Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије „Динамика нелинеарних физичкохемијских и биохемијских система са моделирањем и предвиђањем њихових понашања под неравнотежним условима“) од 1. октобра 2013. Од 1. новембра 2014. запослен је као асистент на Факултету за физичку хемију, где је држао вежбе у оквиру предмета: Увод у лабораторијски рад, Статистичка термодинамика, Математичке методе у физичкој хемији, Физичка хемија чврстог стања, Физичка хемија 1 за студенте Хемијског факултета и Физичка хемија 2 за студенте Хемијског факултета.

Кандидат је од 2013. године учесник у научном пројекту Министарства за науку Републике Србије („Динамика нелинеарних физичкохемијских и биохемијских система са моделирањем и предвиђањем њихових понашања под неравнотежним условима“, бр. 172015, руководилац пројекта је др Љиљана Колар-Анић, професор емеритус). Такође учествовао је и на две COST акције: CM1304 “Emergence and Evolution of Complex Chemical Systems” (од 2013. до 2017. године) и COST Action CA15107 Multi-Functional Nano-Carbon Composite Materials Network (од 2017. године), као и на билатералном пројекту са Кином 6ICZSD “Preparation of high-grade synthetic rutile from titania slag under microwave heating”.

Током прошле године усавршавао се на семинарима “Modelling and Simulation of Superalloys” које је организовао Универзитет у Бохуму, Немачка и “Atomistic Simulations of Thermal Transport Across Interfaces” у организацији QuantumWise, Копенхаген, Данска. Прошао је тренинг за коришћење програмског језика CUDA у паралелном програмирању (2013. година), као и тренинг за коришћење компјутера високих перформанси (2012. година) које је организовао Институт за физику.

Активно учествује у манифестацијама које популаризују науку и промовишу факултет.

Члан је Друштва физикохемичара Србије и Српског хемијског друштва. Био је члан локалног извршног одбора XI, XII и XIII International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry, у организацији Друштва физикохемичара Србије, 2012, 2014. и 2016. године.

У периоду од 2005. до 2011. године, био је стипендиста “Републичке фондације за развој научног и уметничког подмлатка”, а у периоду од 2011. до 2013. године био је стипендиста “Фонда за младе таленте - Доситеја”. Добитник је награда: Фондације “Сестре Булајић” за најбоље дипломске радове (2013. година), “Фондације Хемофарм” за студенте природних наука који су постигли изванредне успехе током студија (2013. година), “Српског хемијског друштва” за изузетна постигнућа током студија (2013. година), “Друштва физикохемичара Србије” за изузетна постигнућа током студија (2014. година), “Пупинове награде Матице српске” за најбоље дипломске и мастер радове (2014. година) и “Фонда за хемијске науке - Ненад М. Костић” за најбоље дипломске и мастер радове (2014. година).

Говори енглески и немачки језик.

Области његовог научног интересовања су: физичка хемија чврстог стања и граничних површина, моделирање сложених процеса и реакција, компјутациона и математичка хемија.

Б. Библиографија

1. Магистарске и докторске тезе

1.1. Одбрањена докторска дисертација (M71)

“Примена метода дисперзне кинетике у проучавању кинетике одабраних физикохемијских процеса и реакција у чврстом стању”, Факултет за физичку хемију, Универзитет у Београду, Београд, 2017.

2. Објављени радови

2.1. Рад у тематском зборнику међународног значаја (M14)

2.1.1. B. Stanković, S. Anić, “Short review on the models of Bray-Liebhafsky oscillatory reaction”, Scientific Review Series: Scientific and Engineering- Special Issue Nonlinear Dynamics, S2 (2013) 89-112, (Ed. Katica (Stevanovic) Hedrih), Serbian Scientific Society

2.2. Рад у међународном часопису изузетних вредности (M21a):

- 2.2.1. B. Stanković, B. Ostojić, A. Popović, M. Gruden, D. Đorđević, “Theoretical study of nitrodibenzofurans: A possible relationship between molecular properties and mutagenic activity”, *J. Hazard. Mater.*, 318 (2016) 623-630.

2.3. Радови у врхунским међународним часописима (M21):

- 2.3.1. B. Stanković, Ž. Čupić, S. Maćešić, N. Pejić, Lj. Kolar-Anić “Complex bifurcation in the oscillatory reaction model”, *Chaos Solitons and Fractals*, 87 (2016) 84-91.
- 2.3.2. B. Potkonjak, J. Jovanović B. Stanković, S. Ostojić, B. Adnađević “Comparative analyses on isothermal kinetics of water evaporation and hydrogel dehydration by a novel nucleation kinetics model”, *Chem. Eng. Res. Design*, 100 (2015) 323-330.
- 2.3.3. B. Ostojić, B. Stanković, D. Đorđević, “Theoretical study of the molecular properties of dimethylantracenes as properties for the prediction of theirs biodegradation and mutagenicity”, *Chemosphere*, 111 (2014) 144-150.
- 2.3.4. B. Ostojić, B. Stanković, D. Đorđević, “The molecular properties of nitrobenzanthrone isomers and their mutagenic activities”, *Chemosphere*, 104 (2014) 228-236.
- 2.3.5. Ž. Čupić, A. Ivanović-Šašić, S. Anić, B. Stanković, J. Maksimović, Lj. Kolar-Anić, G. Schmitz, “Tourbillion in the Phase Space of the Bray-Liebhafsky Nonlinear Oscillatory Reaction and Related Multiple-Time-Scale Model”, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, 69 (2013) 805-830.

2.4. Радови у истакнутим међународним часописима (M22):

- 2.4.1. B. Stanković, J. Jovanović, S. Ostojić, B. Adnađević, “Kinetic analysis of non-isothermal dehydration of poly (acrylic acid)-g-gelatin hydrogel using distributed activation energy model”, *J. Therm. Anal. Calorim.*, 129 (2017) 541-551.
- 2.4.2. J. Jovanović B. Stanković, B. Adnađević, “Kinetics of isothermal dehydration of equilibrium swollen PAAG hydrogel under the microwave conditions”, *J. Therm. Anal. Calorim.*, 127 (2017) 655-662.
- 2.4.3. B. Stanković, B. Ostojić, A. Popović, M. Gruden, D. Đorđević, “Substituted naphthalenes: Stability, conformational flexibility and description of bonding based on ETS-NOCV method”, *Chem. Phys. Lett.*, 661 (2016) 136–142.

2.5. Рад у међународном часопису (M23):

- 2.5.1. B. Ostojić, B. Stanković, D. Đorđević, “Aromaticity and conformational deformability of some environmental pollutants - methylated anthracenes”, *Fresenius Environmental Bulletin*, 23 (12) (2014) 3036-3040.

2.6. Рад у врхунском националном часопису (M51) :

- 2.6.1. K.Stevanović, J. Maksimović, B. Stanković, M. Pagnacco, “Određivanje eksperimentalnih uslova za ispitivanje analita u Bray-Liebhafsky oscilatornoj reakciji u otvorenom reaktoru”, *Tehnika*, 4 (2017), 473-480.

3. Зборници са научних скупова

3.1. Саопштења са међународних скупова штампана у целини (M33)

- 3.1.1. B. Stanković, J. Jovanović, B. Adnađević, “Distributed activation energy model as a new method for investigation of poly(acrylic acid)-g-gelatin hydrogel non-isothermal dehydration kinetics”, 13th International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry PHYSICAL CHEMISTRY 2016, Belgrade, 2016, Proceedings, Vol. 1, 255-258.
- 3.1.2. F. Marinković B. Stanković, J. Jovanović “The effect of frequency and water content on dielectric properties of PAA hydrogel”, 13th International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry PHYSICAL CHEMISTRY 2016, Belgrade, 2016, Proceedings, Vol. 2, 673-676.
- 3.1.3. B. Stanković, Ž. Čupić, S. Maćešić N. Pejić, Lj. Kolar-Anić, “Merging and annihilation of saddle loop, supercritical and subcritical Andronov-Hopf bifurcations”, 12th International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry PHYSICAL CHEMISTRY 2014, Belgrade, 2014, Proceedings, Vol. 1, 356-359.
- 3.1.4. B. Stanković, Ž. Čupić, N. Pejić, Lj. Kolar-Anić, “One scenario for transition from supercritical to subcritical Andronov-Hopf bifurcation point”, Fourth Serbian (29th Yu) Congress on Theoretical and Applied Mechanics, Vrnjačka Banja, Serbia, 2013, Proceedings, 895-898.
- 3.1.5. B. Stanković, Ž. Čupić, Lj. Kolar-Anić, “Devil’s staircase in mixed-mode oscillations of the Bray-Liebhafsky reaction”, 11th International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry PHYSICAL CHEMISTRY 2012, Belgrade, 2012, Proceedings, Vol. 1, 282-284.

3.2. Саопштење са међународног скупа штампано у изводу (M34):

- 3.2.1. K. Stevanović, I. N. Bujanja, J. Maksimović, B. Stanković, M. Pagnacco, S. Maćešić, Ž.Čupić, Lj. Kolar-Anić, “Bifurcation in the complex Bray-Liebhafsky oscillatory reaction as a function of the hydrogen-peroxide concentration“, Fifth conference on Information theory and complex systems, Тинкос, Belgrade 2017, Book of Abstracts, 4-5.
- 3.2.2. B.Stankovic, F.Marinkovic, B.Adnadjevic, J.Jovanovic, “The effects absorbed water on the dielectric properties of PAA hydrogel“, XII Students Congress of Society of Chemists and Technologists of Macedonia, Skopje, Macedonia, 2017.
- 3.2.3. B. Stanković, J. Jovanovic, B. Adnadjevic, “Application of various mathematical methods on modeling of fullerole dehydroxylation“, Mathematics in (bio)Chemical Kinetics and Engineering (MaCKiE 2017), Budapest, Hungary, 2017, Book of Abstracts, 64-65.
- 3.2.4. K Stevanović, B. Stanković, J. Maksimović, M. Pagnacco, “Determination of experimental conditions for examination of cobalt catalyst supported by polymer in Bray-Liebhafsky

oscillatory reaction performed in open reactor“, 15th Young Researchers Conference – Materials Science and Engineering, Belgrade 2016, Book of Abstracts, p 20.

- 3.2.5. G. Chen, J. Chen, M. Gigov, J. Jovanović, S. Petković, B. Stanković, “Prepared synthetic rutile from sulphate titanium slag using microwave heating”, The Fifth Sebian Ceramics Society Conference - ADVANCED CERAMICS AND APPLICATIONS, Belgrade, Serbia, 2016, Book of Abstracts, p 60
- 3.2.6. J. Jovanović, B. Stanković, B. Adnadjević, “Influence of Microwave Heating on the Kinetics of Isothermal Dehydration of Equilibrium Swollen PAAG Hydrogel”, CEEC-TAC3 3rd Central and Eastern European Conference on Thermal Analysis and Calorimetry, Ljubljana, Slovenia, 2015, Book of Abstracts, p 191
- 3.2.7. B. Stanković, B. Ostojić, D. Đorđević, “The molecular properties of nitrodibenzofurans and their mutagenic activities”, 18th International Symposium on Environmental Pollution and its Impact on Life in the Mediterranean Region, Crete, Greece, 2013, Book of Abstracts, p 246
- 3.2.8. B. Stanković, B. Ostojić, D. Đorđević, “Theoretical investigation of molecular properties of methyl-substituted anthracenes and biodegradation”, 17th International Symposium on Environmental Pollution and its Impact on Life in the Mediterranean Region, Istanbul, 2013 (on CD)
- 3.2.9. B. Stanković, Ž. Čupić, Lj. Kolar-Anić, “Types of bifurcations in Bray-Liebhafsky oscillatory reaction”, Symposium nonlinear dynamics-Milutin Milanković (SNDMIA 2012), Belgrade, 2012, Booklet of Abstracts, 129-130.
- 3.2.10. S. Mačević, V. M. Marković, B. Stanković, V. Vukojević, Ž. Čupić, Lj. Kolar-Anić, “Modeling of the chaotic states in the Hypothalamic-Pituitary-Adrenal (HPA) axis activity”, 5th Chaotic Modeling and Simulation International Conference CHAOS 2012, Athens, Greece, 2012, Book of Abstracts, p 85
- 3.2.11. B. Stanković, S. Mačević, A. Ivanović, S. Anić, Ž. Čupić, Lj. Kolar-Anić, “Complex dynamic states in the model for hydrogen peroxide decomposition”, 5th Chaotic Modeling and Simulation International Conference CHAOS 2012, Athens, Greece, 2012, Book of Abstracts, 150-151
- 3.2.12. B. Stanković, Ž. Čupić, Lj. Kolar-Anić, “Bray-Liebhafsky oscillatory reaction as the matrix for testing the catalysts: Optimizations of conditions when reaction is performed in open reactor”, Tenth young researcher’s conference: Materials science and Engineering, Belgrade, 2011, Program and the Book of Book of Abstracts, p 18

3.3. Саопштење са националног скупа штампано у изводу (M64):

- 3.3.1. K. Stevanović, B. Stanković, M. Pagnacco, “Effect of light on the reaction of iodine oxidation with hydrogen peroxide in acidic medium: Determination of activation energy”, Fourth Conference of Young Chemists of Serbia, Belgrade 2016, Book of Abstracts, p. 28.

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

Укупно: $M = 86,60$ (за научног сарадника потребно 16)

$$M_{10}+M_{20}+M_{31}+M_{32}+M_{33}+M_{41}+M_{42} = 1 \times 4 + 1 \times 10 + 5 \times 8 + 3 \times 5 + 1 \times 3 + 5 \times 1 + 12 \times 0,5 = 78,40$$

$$M_{11}+M_{12}+M_{21}+M_{22}+M_{23}+M_{24} = 1 \times 4 + 1 \times 4 + 1 \times 10 + 5 \times 8 + 3 \times 5 + 1 \times 3 = 67,71$$

V. Квалитативна оцена научног доприноса

1. Показатељи успеха у научном раду

Научно - истраживачка активност др Бранислава Станковића је била усмерена на : 1) примену постојећих и развој нових модела дисперзне кинетике за описивање процеса и реакција у чврстом стању, 2) теоријско проучавање молекулских особина супституисаних полицикличних ароматичних угљоводоника и 3) моделирање и бифуркациону анализу Брау-Лиџовског осцилаторне реакције. Међу најзначајнијим резултатима кандидатовог научног рада истичу се: 1) развој новог нуклеационог модела којим се може описати процеси испаравања воде и дехидратације хидрогела под различитим условима активације, 2) дефинисање параметра који детерминишу вредности мутагене активности и брзине биодеградације неких супституисаних полицикличних ароматичних угљоводоника, као и оријентационо предвиђање ових двеју величина код молекула за које не постоје експериментални подаци и 3) пионирско проучавање начина на који бифуркације прелазе једна у другу у комплексним динамичким системима.

Кандидат је добитник награда Фондације “Сестре Булајић” за најбоље дипломске радове (2013. година), “Фондације Хемофарм” за студенте природних наука који су постигли изванредне успехе током студија (2013. година), “Српског хемијског друштва” за изузетна постигнућа током студија (2013. година), “Друштва физикохемичара Србије” за изузетна постигнућа током студија (2014. година), “Пупинове награде Матице српске” за најбоље дипломске и мастер радове (2014. година) и “Фонда за хемијске науке - Ненад М. Костић” за најбоље дипломске и мастер радове (2014. година). Био је члан локалног извршног одбора XI, XII и XIII International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry, у организацији Друштва физикохемичара Србије, 2012., 2014. и 2016. године.

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

Кандидат је запослен је као асистент на Факултету за физичку хемију, где је држао вежбе у оквиру предмета: Увод у лабораторијски рад, Статистичка термодинамика, Математичке методе у физичкој хемији, Физичка хемија чврстог стања, Физичка хемија 1 за студенте Хемијског факултета и Физичка хемија 2 за студенте Хемијског факултета. Поред овога активно учествује на манифестацијама које популаризацију науке и промовишу факултет. Помагао је студентима при изради дипломских радова из области физичке хемије чврстог стања.

Поред учешћа на научном пројекту Министарства за науку Републике Србије („Динамика нелинеарних физичкохемијских и биохемијских система са моделирањем и предвиђањем њихових понашања под неравнотежним условима“, бр. 172015, руководилац пројекта је др Љиљана Колар-Анић, професор емеритус), кандидат је учествовао је и на две COST акције: CM1304 “Emergence and Evolution of Complex Chemical Systems” (од 2013. до 2017. године) и COST Action CA15107 Multi-Functional Nano-Carbon Composite Materials Network (од 2017. године), као и на билатералном пројекту са Кином 6ICZSD “Preparation of high-grade synthetic rutile from titania slag under microwave heating”.

3. Организација научног рада

Сходно годинама, кандидат није руководио ниједним пројектом, потпројектом, нити радним задатком, као ни другим научним и стручним друштвима и телима унутар Министарстава.

4. Квалитет научних резултата

Кандидат је публикувао 1 рад у тематском зборнику међународног значаја M14, 10 радова у међународним часописима (од тога 1 рад у међународним часописима изузетних вредности M21a, 5 радова у врхунским међународним часописима M21, 3 рада у истакнутом међународним часописима M22, и 1 рад у међународном часопису M23), 1 рад у водећем националном часопису M51 и 17 саопштења на међународним конференцијама (од којих је 5 штампано у целини, а 12 у изводу) и једно саопштење са националне конференције штампано у изводу. Резултати су цитирани у научној литератури 41 пута, од чега 11 пута од стране других аутора. Од свих радова кандидата, радо M21a категорије и један рад M22 категорије, као и три M34 конференције имају ефективно већи број коаутора.

Кандидат је учествовао у свим фазама израде радова, од дизајнирања истраживања, извођења теоријских прорачуна, нумеричких симулација и експеримената, израде слика и табела, до писања текста. Кандидат је први аутор на 5 рада.

Г. Кратак приказ радова

У радовима 2.3.2., 2.4.1. и 2.4.2. кандидат се бавио применом и развојем модела дисперзне кинетике на процесе испаравања воде и дехидратације композитног хидрогела полиакрилне киселине и желатина (ПАГ хидрогел). У раду 2.3.2. извршена је упоредна анализа изотермног испаравања воде и дехидратације ПАГ хидрогела при условима конвенцијалног загревања. Применом изоконверзионог метода, показано је да су оба ова процеса кинетички комплекса и да се њихова кинетика знатно разликује. Другим речима показано је да се привидни кинетички параметри испаравања воде и дехидратације хидрогела мењају током самих процеса, као и да се њихове вредности међусобно разликују. Из овога је закључено да мада ПАГ хидрогел у свом набубрелом стању садржи преко 99% воде, структура воде у њему није иста као структура обичне воде. У раду је такође развијен нуклеациони модел, којим су описани испитивани процеси. Овиме се оба процеса могу подвести под јединствени механизам. Дехидратација хидрогела је описана линеарном

комбинацијом двеју моделних једначина нуклеационог модела, што указује да у ПАГ хидрогелу постоје два типа воде у хидрогелу.

У раду 2.4.1. извршено је испитивање неизотермне кинетике дехидратације ПАГ хидрогела при конвенционалним условима загревања. Показано је да начин активације процеса мења кинетику самог процеса. Другим речима за разлику од кинетике изотермне дехидратације, где привидна енергија активације расте са степеном конверзије, при неизотермним условима привидна енергија активације опада. Кинетика неизотермне дехидратације је описана моделом расподеле енергија активације. Изведен је поступак по коме се модел расподеле енергије може повезати са моделима кинетике који се уобичајено користе у описивању процеса и реакција у чврстом стању. У конкретном случају, показано је да се неизотермна дехидратација ПАГ хидрогела одвија по нуклеационом механизму.

У раду 2.4.2. извршена је анализа изотермне кинетике дехидратације ПАГ хидрогела при условима микроталасног загревања при константним хлађењем. Показано је да се кинетика овог процеса може описати Полани-Вингерововим моделом, као и да је овај модел гранични случај нуклеационог модела изведеног у раду 2.3.2. Другим речима, показано је да се услед нетермалне апсорпције микроталасног зрачења повећања број потенцијалних центара за дехидратацију, што доводи до тога да кинетички модел процеса прелази из комплексног у елементаран. На основу вредности кинетичких параметара закључено је дехидратација хидрогела при микроталасном загревању знатно бржа него при конвенционалном загревању (при истој температури) захваљујући драстично већим вредностима предекспоненцијалног фактора.

У радовима 2.2.1, 2.3.3., 2.3.4., 2.4.3 и 2.5.1. квантно-хемијским методама су испитане молекулске особине низа деривата полицикличних ароматичних угљоводоника како би се пронашло које од њих се могу повезати са експериментално нађеним вредностима мутагених активности у сојевима *Salmonella-e typhimurium* и брзинама биоразградње помоћу ензима нафтаген 1,2-диоксигеназе. Из оптимизованих геометрија полицикличних ароматичних угљоводоника пронађени су: вертикални јонизациони потенцијали (IP), вертикални афинитети према електрону (EA), релативне електронске (ΔE) и енергије кориговане на нулти вибрациони ниво (ΔE_{EV}), диполни моменти (μ), усредњене поларизабилности ($\langle \alpha \rangle$), анизотропије поларизабилности ($\Delta \alpha$) и суме до интензитетима у ИЦ спектрима (ΣI_{IR}) и по Раманским активностима (ΣA_{Raman}) и други параметри од значаја. У раду 2.2.1. испитивани су изомери нитродибензофурана (НДФ) и динитродибензофурана (ДНДФ). Показано је да од свих наведених параметара са експериментално пронађеним вредностима мутагених активности изомера НДФ-а најбољу корелацију показују $\langle \alpha \rangle$ и $\Delta \alpha$. Закључено је да је за високу мутагену активност појединих изомера НДФ-а заслужна јачина дисперзионих и индукционих интеракција у ензим-супстрат комплексу. Такође у раду су извршене и анализе веза између нитро групе и остатка молекула и веза између кисеоника и угљеника у средњем прстену изомера НДФ-а. Мутагена активност већа код изомера са слабијим везама. Испитивањем теоријски добијених Раманских спектра показано је да се мутагена активност у релативно доброј корелацији са Раманском активношћу симетричне вибрације нитро групе. Утврђено је да се изведени закључци највероватније могу проширити и на изомере ДНДФ-а.

У раду 2.3.3. су одређене молекулске особине изомера диметилантрацена (ДМА) и њихова корелација се мутагеним активностима и брзинама биодеградације ових изомера. Анализом димензија изомера ДМА-а и активног места ензима нафтаген 1,2-диоксигеназе утврђено је да се може очекивати да су сви изомери биоразградиви. Показано је да се сви

изомери карактеришу малим вредностима μ , као и сличним вредностима IP и EA (и другим дескрипторима повезаним са овим величинама). Вредности поларизабилности се врло разликују у зависности од места супституције двеју метил група и то тако да расту идући од изомера који имају две супституисане метил групе у мезо позицији до изомера са две метил групе у бета позицији. Утврђено је да за изомере за које постоје експериментални подаци о мутагености (*S. Typhimurium* (strains TA98 and TA100)), вредности $\langle\alpha\rangle$, $\Delta\alpha$ и ΣA_{Raman} корелирају са испољеним мутагеним активностима. Предвиђен је тренд у биодеградацији ових изомера.

У раду 2.3.4. испитана је веза мутагене активности изомера нитробензантрона (НБА) и поменутих физичкохемијских параметара. Резултати су показали да електронски афинитети изомера, као и IP вредности, не могу да корелирају са експериментално добијеним мутагеним активностима изомера НБА. Добра корелација је нађена између ΣA_{Raman} вредности и директне мутагене активности у *S. Typhimurium* TA98 соју. За друге *S. Typhimurium* сојеве нађена је такође добра корелација између ΣA_{Raman} вредности и логаритма директне мутагене активности, што упућује на закључак да дисперзионе и индукционе интеракције играју важну улогу у процесу мутагене активације ових изомера. Анализа Раманских спектра указује да код изомера НБА чије су мутагене активности ниске постоји одсуство интензивних прелаза који укључују истежуће вибрације N-O и C-N веза. Представљене спектроскопске карактеристике изомера у области $1000-1700\text{ cm}^{-1}$ могу бити од помоћу у идентификацији и разликовању испитиваних НБА изомера.

У раду 2.4.3. је анализирана молекулска структура и конформациона деформабилност изомера диметилнафталена (ДМН) као и одабраних изомера триметилнафталена (ТМН), тетраметилнафталена (ТеМН), дихлорнафталена (ДХН) и диаминонафталена (ДАН). Показано је да ароматични прстенови изомера показују високу флексибилност за промену конформације. За изомере ДМН за прелаз из равнотежне планарне геометрије ароматичних прстенова у непланарну конформацију са одговарајућим торзионим углом од 20° праћен је порастом енергије у опсегу $1.7-2.4\text{ kcal/mol}$. Пронађена је корелација између средњих константи ригидности прстениова и релативних енергија изомера ДМН-а. Коришћењем EDA и ETS-NOCV метода одређени су фактори од значаја за опис веза код супституисаних нафталена. Такође су идентификовани главни канали промене електронске густине при формирању веза од значаја.

У раду 2.5.1 су приказани резултати анализе ароматичности прстенова и конформационе деформабилности изомера ДМА-а. Добијене вредности индекса ароматичности $NICS(1)_{zz}$ показују ниже вредности код бочних прстенова изомера код којих су обе метил групе супституисане у α позицији у односу на $NICS(1)_{zz}$ вредности бочних прстенова изомера код којих су обе метил групе супституисане у β позицији. Израчунате вредности Фукуи функција код изомера ДМА показују да су C1-C2, C3-C4, C5-C6 и C7-C8 везе највише подложне електрофилном нападу, што је од значаја за реакције диоксигенације на ароматичним прстеновима ДМА у процесу биодеградације.

У радовима 2.3.1., 2.3.5 и 2.6.2. кандидат се бавио испитивањем Bray-Liebhafsky (BL) реакције у отвореном реактору, док рад 2.1.1. представља прегледни рад у коме су укратко дат критички осврт на моделе ове реакције. У раду 2.3.1. испитивано су мешање, прелази и међусобно поништавање три од четири основна тима бифуркација: суперкритичне Андронов-Хопфове бифуркације, бифуркације двоструке петље и бифуркације седласте петље. У ову сврху коришћен је нелинеарни модел BL реакције са шест реакционих врста.

Променом протока, као контролног параметра, нумеричким симулацијама је праћена промена динамичких стања дуж бифуркације, док је променом почетне концентрације водоник пероксида праћена еволуција бифуркација. Како прелази између ових бифуркација до сада у литератури нису теоријски нађени, закључено је да једно од објашњења постојања оваквих прелаза може бити важеће закона од одржању маса, који у чисто математичком смислу не мора важити. Резултати нумеричких симулација су упоређени са постојећим експерименталним подацима, чиме је потврђено да до прелаза између бифуркација полази и у самој реакцији, те да ово није само феномен се може добити само нумерички.

У раду 2.3.5. конструисан је дијаграм стања у функцији почетне концентрације водоник пероксида и протока врста у отвореном реактору. Затим су анализирани осцилације мешаних модова као феномен који се може наћи у нелинеарним системима у којима се процеси (реакције) дешавају на више временских скала. Како би се ово урадило израчунате су сингуларне тачке на критичном манифолду целокупног система и пронађене Андроноу-Хопфове бифуркационе тачке подсистема врста које реагују на краћим временским скалама. Показано је да се услед интеракције између ова два сингуларитета јавља динамичка структура у математици позната као турбилион, што је дало теоријског основа за објашњење постојања осцилација мешаних модова у VL реакцији, али и другим осцилаторним реакцијама. У раду су такође дате и експериментално нађене осцилације мешаних модова, како би се резултати нумеричких симулација потврдили.

У раду 2.6.2. извршена је експериментална бифуркациона анализа VL реакције у циљу налажења погодне бифуркационе тачке у близини које би се VL осцилаторни систем могао користити као матрица за испитивање различитих супстанци. Променом температуре и протока као контролних параметара пронађена је Андроноу-Хопфова суперкритична бифуркација у околини које је систем осетљив на пертурбације.

Оцена комисије о научном доприносу кандидата са образложењем

На основу приложене и прикупљене документације о кандидату, биографских података и прегледа научно-истраживачког рада кандидата, Комисија закључује да кандидат Бранислав Станковић, доктор физичкохемијских наука, запослен као асистент на Факултету за физичку хемију, поред одбрањене докторске дисертације, има и: 1 рад у тематском зборнику међународног значаја M14, 10 радова у међународним часописима (од тога 1 рад у међународним часописима изузетних вредности M21a, 5 радова у врхунским међународним часописима M21, 3 рада у истакнутом међународним часописима M22, и 1 рад у међународном часопису M23), 1 рад у водећем националном часопису M51 и 17 саопштења на међународним конференцијама (од којих је 5 штампано у целини, а 12 у изводу) и једно саопштење са националне конференције штампано у изводу. Од свих радова кандидата, два рада и три конференције имају ефективно већи број коаутора. Резултати су цитирани у научној литератури 41 пута, од чега 11 пута од стране других аутора.

Према свему наведеном може се закључити да је др Бранислав Станковић 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.

Комисија стога сматра да су испуњени сви услови на основу којих Наставно-научно веће Факултета за физичку хемију Универзитета у Београду може да утврди предлог да **др Бранислав Станковић** буде изабран у звање **научни сарадник**.

У Београду, 19. 2. 2018.

КОМИСИЈА:

др Боривој Аднађевић, редовни професор
Универзитет у Београду, Факултет за физичку хемију

др Михајло Етински, ванредни професор
Универзитет у Београду, Факултет за физичку хемију

др Јелена Јовановић, научни саветник
Универзитет у Београду, Факултет за физичку хемију

др Бојана Остојић, виши научни сарадник
Универзитет у Београду, Институт за хемију, технологију и металургију