Универзитет у Београду
Институт за хемију, технологију и металургију, ИХТМ Институт од националног значаја за Републику Србију
Његошева 12, Београд

Научном већу Института за хемију, технологију и металургију Универзитета у Београду

На електронској седници **Научног већа Универзитета у Београду Института за хемију, технологију и металургију** одржаној дана 12.07.2023. године, одлуком број 713/12.07.2023, одређени смо за чланове Комисије за подношење извештаја за избор у научно звање НАУЧНИ САВЕТНИК кандидата др Дејана Миленковића, вишег научног сарадника запосленог у Институту за информационе технологије Крагујевац.

На основу прегледа приложене документације подносимо следећи

ИЗВЕШТАЈ

1. БИОГРАФСКИ ПОДАЦИ

Др Дејан Миленковић је рођен 05.01.1982. године у Крагујевцу. Основну школу завршио је у Крагујевцу, а средњу Пољопривредно-ветеринарску школу у Рековцу. Природно-математички факултет, група хемија, Универзитета у Крагујевцу уписао је школске 2001. године, а дипломирао 2007. године са просечном оценом 8,28. Дипломски рад на тему "Зависност енергије активације нуклеофилне адиције енолатног анјона етил-ацетата на етил-ацетат од HOMO-LUMO гепа одговарајућих реактаната" одбранио је 12.03.2007. године са оценом 10. Докторске академске студије, смер Органска хемија, на Природно-математичком факултету у Крагујевцу уписао је школске 2010/2011. године и положио је све предвиђене испите са просечном оценом 10 (десет).

Докторску дисертацију под називом „Механизми антиоксидативног деловања бајкалеина“, одбранио је на Природно-математичком факултету 03. фебруара 2014. године. (ментор: проф. др. Зоран Марковић), на основу чега је добио звање доктор наука – хемијске науке.

Професионална каријера

Др Дејан Миленковић је од 02. септембра 2019. године запослен је на Институту за информационе технологије Крагујевац, Универзитета у Крагујевцу као виши научни сарадник.

Др Дејан Миленковић је ангажован на новооснованом Институту за информационе технологије Крагујевац, Универзитета у Крагујевцу, у Департману за природно-математичке науке, где се активно бави научно-истраживачким радом у области органске физичке хемије, прецизније, бави се испитивањем физичко - хемијских особина различитих природних једињења која имају широку примену у области прехрамбене технологије. Примена антиоксидативних једињења има све већи значај у људској исхрани у циљу спречавања развоја многих болести, као што су канцер, атеросклероза, кардиоваскуларна обољења, итд. Сам механизам деловања антиоксиданата у превенцији још увек није детаљно објашњен. Један од циљева истраживања је, да се применом комплементарних истраживачких приступа, допринесе бољем разумевању структурних и електронских особина природних једињења (полифенола, кумарина и деривата кумарина) као и механизма антиоксидативног деловања природних једињења: **HAT** (Hydrogen Atom Transfer) - пренос атома водоника; **SPLET** (Sequential Proton Loss Electron Transfer) - губитак протона праћен преносом електрона; **RAF** (Radical adduct formation) - формирање радикалског производа и **SET-PT** (Single Electron Transfer – Proton Transfer) - трансфер електрона праћен трансфером протона). Др Дејан Миленковић је дао значајан допринос у расветљавању новог механизма антирадикалског деловања деривата кумарина према слободно радикалским врстама (OH и OOH радикалима) применом термодинамичког и кинетичког приступа, **RAF-HAA** (Radical adduct formation followed by hydrogen atom abstraction) - формирање радикалског производа праћен преносом атома водоника. Резултат оваквог приступа води добијању

стабилних и мање токсичних производа од полазних једињења. Предложени механизам је потврђен експериментално помоћу електронске парамагнетне резонантне (EPR) и УВ-Вис спектроскопије. Резултати ових истраживања су објављени у 2020. и 2021. години у престижном међународном научном часопису на SCI листи "Chemical Engineering Journal" (ИФ=16.744 за 2021. годину). Поред тога, др Дејан Миленковић се бави испитивањима протеин-лиганд интеракција применом симулације молекулског докинга и молекулске динамике. Применом молекулског докинга и молекулске динамике испитана је инхибиторна активност деривата кумарина и њихових комплекса са Pd(II) јоном према рецептору SARS-CoV-2 вируса који изазива COVID 19. Прелиминарни резултати су показали да испитани кумарински деривати и њихови комплекси са Pd(II) имају бољу инхибиторну активност за везивање са рецептором SARS-CoV-2 него стандардни лекови који су одобрени од FDA агенције. Резултати ових истраживања су објављени у 2020. години у престижном међународном научном часопису на SCI листи "RSC Advances" (ИФ=3.361 за 2020. годину). Као резултат свега рад је проглашен као "**Hot paper**" од стране уредника часописа. Из досадашњих кандидатових истраживања проистекли су радови у врхунским међународним часописима и радови у истакнутим међународним часописима. Др Дејан Миленковић је до сада постигао значајне резултате у научно-истраживачком раду, што је верификовано објављивањем 56 научних радова као први аутор, аутор за коресподенцију и коаутор. Сви радови су објављени у часописима на SCI листи. Објавио је преко 60 саопштења на домаћим и међународним скуповима. Држао је усмена излагања на научним скуповима од међународног и националног значаја. Сви резултати кандидата усмерени су ка расветљавању антиоксидативних механизама различитих природних једињења, испитивању протеин-лиганд интеракција применом *in silico* метода и испитивању квантитативног односа структуре и испитивању квантитативног односа структуре и активности (**Q**uantitative **S**tructure–**A**ctivity **R**elationship, **QSAR**) одабраних природних једињења.

Др Дејан Миленковић је био две године руководилац Департмана за природно-математичке науке на Институту за информационе технологије Крагујевац, Универзитета у Крагујевцу и дао је значајан допринос у развоју научно-

истраживачког рада на новооснованом Институту. Након истека мандата на месту руководиоца Департмана, др Дејан Миленковић је именован за Помоћника директора за научно-истраживачки рад на Институту за информационе технологије Крагујевац.

Научни и стручни резултати

Учествује у реализацији 2 домаћа пројекта и учесник је на 1 међународном пројекту. Био је учесник на 3 међународна пројекта. Као аутор и коаутор објавио је 59 научних и стручних радова у домаћим и међународним часописима од чега 56 научних радова на SCI листи. Објавио је два поглавља у монографији категорије М13, као и преко 60 саопштења на домаћим и међународним скуповима. Држао је усмена излагања на научним скуповима од међународног и националног значаја. Др Дејан Миленковић је остварио висок степен самосталности у научно-истраживачком раду, који се огледа у осмишљавању истраживања, креирању, планирању и реализацији спроведених истраживања, анализи резултата, писању и публиковању радова, као и писању пројеката.

Др Дејан Миленковић остварио је висок ниво квалитета у научним истраживањима у физичкој органској хемији, као и у расветљавању антиоксидативних механизама различитих природних једињења и тиме је остварио значајан утицај на развој у поменутој области.

Учешће на научним пројектима

Период	Назив научног пројекта	Носилац пројекта/ финасијер
2023-2025	Билатерални пројекат СРБИЈА СЛОВЕНИЈА: „Развој компјутерског протокола за процену деривата 4-хидроксикумарин-неуротрансмитера у превенцији Алцхајмерове болести (Development of a computational protocol to evaluate 4-hydroxycoumarin-neurotransmitter derivatives in the treatment of Alzheimer`s disease)“	Сарадња између Института за информационе технологије Крагујевац – руководилац пројекта др Дејан Миленковић и National Institute of Chemistry – руководилац пројекта Јанез Конц; Министарство науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије, бр. 337-00-110/2023-05/20.
2022-2023	Програм за научноистраживачке односно уметничке пројекте младих	Руководилац пројекта др Дејан Миленковић, бр. VI-03-232

	истраживача и уметника који се финансирају из средстава Центра за научноистраживачки рад САНУ и Универзитета у Крагујевцу и Универзитета у Крагујевцу, „Антиоксидативни потенцијал новосинтетисаних кумарин *N*-ацилхидразонских деривата“	
2021-2022:	Balkan-Network у оквиру пројекта DAAD HAW	Руководилац пројекта је проф. др Зоран Марковић.
2016.-2017.	Билатерални пројекат СРБИЈА ХРВАТСКА "Испитивање хемизма и антиоксидативне активности комлекса полифенолних једињења са есенцијалним металима"	Руководилац пројекта је проф. др Светлана Марковић. Министарство просвете и науке Р. Србије
2014.-2015.	Билатерални пројекат СРБИЈА ФРАНЦУСКА: „Развој теоријских методологија за процену антиоксидативне активности полифенола: пут ка применама у реалном животу (Development of Theoretical Methodology for Polyphenol Antioxidant Evaluation: Towards real-word applications)“	Сарадња између Универзитета у Новом Пазару – руководилац пројекта Зоран Марковић и Universite de Limoges – руководилац пројекта Patrick Trouillas. Министарство просвете и науке Р. Србије, бр. 451-03-3455/2013-09/17.

Место и трајање специјализација и студијских боравака у иностранству

Институт Руђер Бошковић, Загреб, Хрватска, од 03.09. 2011. до 30.09.2011. године – истраживач-сарадник у оквиру билатералног пројекта између Р. Србије и Р. Хрватске.

Институт Руђер Бошковић, Загреб, Хрватска, од 24.09. 2012. до 12.10.2012. године– истраживач-сарадник у оквиру билатералног пројекта између Р. Србије и Р. Хрватске.

Државни универзитет у Северној Дакоти (North Dakota State University-NDSU), Фарго, од 30.07. – 07.10.2018. године – посетилац на размени (J-1 Exchange Visitor Scholar).

Државни универзитет у Северној Дакоти (North Dakota State University-NDSU), Фарго, од 16.05. – 15.08.2023. године – гостујући научник (J-1 Visiting Scientist).

Чланство у стручним и научним асоцијацијама:

- Члан Друштва биофизичара Србије
- Члан Српског Друштва за рачунску механику

Страни језици

- Енглески језик: чита, пише и говори
- Немачки језик: чита и пише

2. БИБЛИОГРАФИЈА

Име и презиме, звање: Дејан Миленковић, виши научни сарадник
ORCID број: 0000-0001-7083-2257
Репозиторијум: ИБИ: AE237
Scopus ID: 36739564600

(А) Радови од претходног избора у звање

1. Монографска студија/поглавље у књизи М11 или рад у тематском зборнику водећег међународног значаја (М13 = 7)

Од претходног избора: М13 = 2x7 = 14

1.1. Zoran Marković, **Dejan Milenković**, Chapter 7 - Different theoretical approaches in the study of antioxidative mechanisms, Computational Modeling in Bioengineering and Bioinformatics, 211-256, 2020, https://doi.org/10.1016/B978-0-12-819583-3.00007-2

ISBN 978-0-12-819583-3
https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/B9780128195833000072?via%3Dihub
Број аутора: 2
М13 = 7

1.2. Edina Avdović, Dušan Dimić, **Dejan Milenković**, Investigation of Coumarin Derivative 3-(1-o-toluidinoethylidene)-chromane-2,4-dione: IR Spectroscopic Characterization, NBO, and AIM Analysis and Molecular Docking Studies, Computational Bioengineering and Bioinformatics Computer, Modelling in Bioengineering, N. Filipovic (Ed.): ICCB 2019, LAIS 11, Springer Nature Switzerland AG 2020, 127–142, 2020. DOI: https://doi.org/10.1007/978-3-030-43658-2_12.

ISBN978-3-030-43657-5
https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-030-43658-2_12#citeas

Број аутора: 3
M13 = 7

2. Радови објављени у међународним часописима; научна критика, уређивање часописа

* је означен рад из 2019. године, објављен након седнице НВ ИХТМ на коме је утврђен предлог одлуке за избор у звање (број одлуке: 1250/17.09.2019 од дана 12.09. 2019. године)

Од претходног избора: M20 = 151.62
Од претходног избора ИФ = 140.4

Радови у међународном часопису изузетних вредности (M21a = 10; 3×10 + 1×6.25 =36.25)

2.1. Žiko Milanović, Dušan Dimić, Marko Antonijević, Milan Žižić, **Dejan Milenković**, Edina Avdović, Zoran Marković, Influence of acid-base equilibria on the rate of the chemical reaction in the advanced oxidation processes: Coumarin derivatives and hydroxyl radical, *Chem. Eng. J.*, **2023**, *453*, 139648; DOI: https://doi.org/10.1016/j.cej.2022.139648

ИФ: 16.744 (2021)
Област: Engineering, Chemical
Цитираност (без аутоцитата): 4 (Scopus)
Број аутора: 7
M21a = 10

2.2. Dušan S. Dimić, **Dejan A. Milenković**, Edina H. Avdović, Đura J. Nakarada, Jasmina M. Dimitrić Marković, Zoran S. Marković, Advanced oxidation processes of coumarins by hydroperoxyl radical: An experimental and theoretical study, and ecotoxicology assessment, *Chem. Eng. J.*, **2021**, *424*, 130331; DOI: https://doi.org/10.1016/j.cej.2021.130331

ИФ: 16.744 (2021)
Област: Engineering, Chemical
Цитираност (без аутоцитата): 13 (Scopus)
Број аутора: 6
M21a = 10

2.3. **Dejan A. Milenković**, Dušan S. Dimić, Edina H. Avdović, Ana D. Amić, Jasmina M. Dimitrić Marković, Zoran S. Marković, Advanced oxidation process of coumarins by hydroxyl radical: Towards the new mechanism leading to less toxic products, *Chem. Eng. J.*, **2020,** *395*, 124971; DOI: https://doi.org/10.1016/j.cej.2020.124971

ИФ: 13.273 (2020)

Област: Engineering, Chemical
Цитираност (без аутоцитата): 43 (Scopus)
Број аутора: 6
M21a = 10

2.4. Ana Amić, Jasmina M Dimitrić Marković, Zoran Marković, **Dejan Milenković**, Žiko Milanović, Marko Antonijević, Denisa Mastiľák Cagardová, Jaime Rodríguez-Guerra Pedregal, Theoretical Study of Radical Inactivation, LOX Inhibition, and Iron Chelation: The Role of Ferulic Acid in Skin Protection against UVA Induced Oxidative Stress, *Antioxidants,* **2021**, *10*, 1303; DOI: https://doi.org/10.3390/antiox10081303

ИФ: 7.675 (2021)
Област: Chemistry, Medicinal
Цитираност (без аутоцитата): 5 (Scopus)
Број аутора: 8
M21a = 10/(1+0.2(8-5)) = 6.25

Радови у истакнутом међународном часопису (M21 = 8; 5×8 + 2×4.44 + 1×6.67 + 1×4=59.55)

2.5. Zoran Marković; Andrei V. Komolkin; Andrei V. Egorov; **Dejan Milenković**; Svetlana Jeremić, Alizarin as a potential protector of proteins against damage caused by hydroperoxyl radical, *Chem-Biol Interact.*, **2023**, *373*, 110395; DOI: https://doi.org/10.1016/j.cbi.2023.110395

ИФ: 5.168 (2022)
Област: Pharmacology & Pharmacy
Цитираност (без аутоцитата): 0 (Scopus)
Број аутора: 5
M21 = 8

2.6. Thomas Eichhorn; Franz Kolbe, Stefan Mišić, Dušan Dimić, Ibrahim Morgan, Mohamad Saoud, **Dejan Milenković**, Zoran Marković, Tobias Rüffer, Jasmina Dimitrić Marković, Goran N. Kaluđerović, Synthesis, Crystallographic Structure, Theoretical Analysis, Molecular Docking studies, and Biological Activity Evaluation of binuclear Ru(II)-1-naphthylhydrazine complex, *Inter. J. Mol. Sci.*, **2023**, *24*, 689; DOI: https://doi.org/10.3390/ijms24010689

ИФ: 6.208 (2021)
Област: Chemistry, Multidisciplinary
Цитираност (без аутоцитата): 10 (Scopus)
Број аутора: 11
M21 = 8/(1+0.2*(11-7)) = 4.44

2.7. Petar Stanić, Biljana Šmi, **Dejan Milenković**, Kinetics and mechanism of amino acid derived 2-thiohydanoin formation reactions, *React. Chem. Eng.*, **2023**, *8*, 699-706; DOI: https://doi.org/10.1039/D2RE00423B

ИФ: 5.200 (2021)
Област: Engineering, Chemical
Цитираност (без аутоцитата): 0 (Scopus)
Број аутора: 3
M21 = 8

2.8. Amirreza Daghighi, Gerardo M Casanola-Martin, Troy Timmerman, **Dejan Milenković**, Bono Lučić, Bakhtiyor Rasulev, In Silico Prediction of the Toxicity of Nitroaromatic Compounds: Application of Ensemble Learning QSAR Approach, *Toxics*, **2022**, *10*, 746; DOI: https://doi.org/10.3390/toxics10120746

ИФ: 4.600 (2022)
Област: Toxicology
Цитираност (без аутоцитата): 2 (Scopus)
Број аутора: 6
M21 = 8/(1+0.2*(6-5)) = 6.67

2.9. Dragana S Šeklić, Tijana Đukić, **Dejan Milenković**, Milena M Jovanović, Marko N Živanović, Zoran Marković, Nenad Filipović, Numerical modelling of WNT/β-catenin signal pathway in characterization of EMT of colorectal carcinoma cell lines after treatment with Pt (IV) complexes, *Comput. Meth. Prog. Bio.*, **2022**, *226*, 107158; DOI: https://doi.org/10.1016/j.cmpb.2022.107158

ИФ: 7.027 (2022)
Област: Engineering, Biomedical
Цитираност (без аутоцитата): 0 (Scopus)
Број аутора: 7
M21 = 8

2.10. Tijana Mićović, Jelena S Katanić Stanković, Rudolf Bauer, Xuehong Nöst, Zoran Marković, **Dejan Milenković**, Vladimir Jakovljević, Marina Tomović, Jovana Bradić, Danijela Stešević, Danilo Stojanović, Zoran Maksimović, *In vitro*, *in vivo* and *in silico* evaluation of the anti-inflammatory potential of Hyssopus officinalis L. subsp. aristatus (Godr.) Nyman (Lamiaceae), *J. Ethnopharma.*, **2022**, *293*, 115201; DOI: https://doi.org/10.1016/j.jep.2022.115201

ИФ: 5.195 (2021)
Област: Chemistry, Medicinal
Цитираност (без аутоцитата): 4 (Scopus)
Број аутора: 12
M21 = 8/(1+0.2*(12-7)) = 4

2.11. Dušan S. Dimić, Goran N. Kaluđerović, Edina H. Avdović, **Dejan A. Milenković**, Marko N. Živanović, Ivan Potočňák, Erika Samoľová, Milena S. Dimitrijević, Luciano Saso, Zoran S. Marković, Jasmina M. Dimitrić Marković, Synthesis, Crystallographic, Quantum Chemical, Antitumor, and Molecular Docking/Dynamic Studies of 4-Hydroxycoumarin-Neurotransmitter Derivatives**,** *Inter. J. Mol. Sci.*, **2022**, *23*, 1001; DOI: https://doi.org/10.3390/ijms23021001

ИФ: 6.208 (2021)
Област: Chemistry, Multidisciplinary
Цитираност (без аутоцитата): 24 (Scopus)
Број аутора: 11
M21 = 8/(1+0.2*(11-7)) = 4.44

2.12. Žiko Milanović, Dušan Dimić, Milan Žižić, **Dejan Milenković**, Zoran Marković, Edina Avdović, Mechanism of antiradical activity of newly synthesized 4,7-dihydroxycoumarinderivatives-experimental and kinetic DFT study, *Inter. J. Mol. Sci.*, **2021**, *22*, 13273; DOI: https://doi.org/10.3390/ijms222413273

ИФ: 6.208 (2021)
Област: Chemistry, Multidisciplinary
Цитираност (без аутоцитата): 3 (Scopus)
Број аутора: 6
M21 = 8

2.13. Ana Amić, Zoran Marković, Jasmina M. Dimitrić Marković, **Dejan Milenković**, Višnja Stepanić, Antioxidative potential of ferulic acid phenoxyl radical, *Phytochemistry*, **2020**,*170*, 112218; DOI: https://doi.org/10.1016/j.phytochem.2019.112218

ИФ: 4.072 (2020)
Област: Plant Sciences
Цитираност (без аутоцитата): 34 (Scopus)
Број аутора: 5
M21 = 8

Радови у истакнутом међународном часопису (M22 = 5; 4×5 + 4×4.17 + 2×3.57=43.82)

2.14. **Dejan Milenković**, Dušan Dimić, Edina Avdović, Dušica Simijonović, Radiša Vojinović, Zoran Marković, A thermodynamic and kinetic HO radical scavenging study and protein binding of baicalein, *J. Chem. Thermodyn.*, **2023**,*185*, 107110; DOI: https://doi.org/10.1016/j.jct.2023.107110

ИФ: 3.269 (2021)

Област: Chemistry, Physical
Цитираност (без аутоцитата): 0 (Scopus)
Број аутора: 6
M22 = 5/(1+0.2*(6-5)) = 4.17

2.15. Jelica Džodić, **Dejan Milenković,** Milica Marković; Zoran Marković, Dušan Dimić, Application of Quantum–Chemical Methods in the Forensic Prediction of Psychedelic Drugs' Spectra (IR, NMR, UV–VIS, and MS): A Case Study of LSD and Its Analogs, *Appl. Sci-Basel.*, **2023**, *45*, 7977-7986; DOI: https://doi.org/10.3390/app13052984

ИФ: 3.269 (2022)
Област: Chemistry, Multidisciplinary
Цитираност (без аутоцитата): 3 (Scopus)
Број аутора: 5
M22 = 5

2.16. Ana Amić, **Dejan Milenković**, Zoran S. Marković, Denisa Cagardová, Jaime Rodríguez-Guerra Pedregal, Jasmina Dimitrić Marković, Impact of the phenolic O−H vs C-ring C−H bond cleavage on the antioxidant potency of dihydrokaempferol. *New J. Chem.*, **2021**, *45*, 7977-7986; DOI: https://doi.org/10.1039/D1NJ00690H

ИФ: 3.925 (2021)
Област: Chemistry, Multidisciplinary
Цитираност (без аутоцитата): 10 (Scopus)
Број аутора: 6
M22 = 5/(1+0.2*(6-5)) = 4.17

2.17. Žiko B Milanović, Marko R Antonijević, Ana D Amić, Edina H Avdović, Dušan S Dimić, **Dejan A Milenković,** Zoran S Marković, Inhibitory activity of quercetin, its metabolite, and standard antiviral drugs towards enzymes essential for SARS-CoV-2: the role of acid–base equilibria. *RSC Adv.*, **2021**, *11*, 2838-2847; DOI: https://doi.org/10.1039/D0RA09632F

ИФ: 4.036 (2021)
Област: Chemistry, Multidisciplinary
Цитираност (без аутоцитата): 28 (Scopus)
Број аутора: 7
M22 = 5/(1+0.2*(7-5)) = 3.57

2.18. Žiko B. Milanović, Dušan S. Dimić, Edina H. Avdović, **Dejan A.Milenković**, Jasmina M. Dimitrić Marković, Olivera R. Klisurić, Srećko R. Trifunović, Zoran S. Marković, Synthesis and comprehensive spectroscopic (X-ray, NMR, FTIR, UV-Vis), quantum chemical and molecular docking investigation Quantum–Chemical 4-hydroxy-2-oxo-2H-chromen-7-yl acetate, *J. Mol. Struc.*, **2021**, *1225*, 129256; DOI: https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2020.129256

ИФ: 3.841 (2021)
Област: Chemistry, Physical
Цитираност (без аутоцитата): 26 (Scopus)
Број аутора: 8
M22 = 5/(1+0.2*(8-7)) = 4.17

2.19. **Dejan A. Milenković,** Dušan S. Dimić, Edina H. Avdović, Zoran S. Marković, Several coumarin derivatives and their Pd(II) complexes as potential inhibitors of SARS-CoV-2 main protease, *in silico* approach. *RSC Adv*., **2020**, *10*, 35099-35108; DOI: https://doi.org/10.1039/D0RA07062A

ИФ: 3.361 (2020)
Област: Chemistry, Multidisciplinary
Цитираност (без аутоцитата): 30 (Scopus)
Број аутора: 4
M22 = 5

2.20. **Dejan Milenković,** Edina Avdović, Dušan Dimić, S. Sudha, D. Ramarajan, Žiko Milanović, Srećko Trifunović, Zoran S. Marković, Vibrational and Hirshfeld surface analyses, quantum chemical calculations, and molecular docking studies of coumarin derivative 3-(1-*m*-toluidinoethylidene)-chromane-2,4-dione and its corresponding palladium(II) complex, *J. Mol. Struc.*, **2020**, *1209*, 127935; DO: https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2020.127935

ИФ: 3.196 (2020)
Област: Chemistry, Physical
Цитираност (без аутоцитата): 33 (Scopus)
Број аутора: 8
M22 = 5/(1+0.2*(8-7)) = 4.17

2.21. D. Ramarajan, Žiko Milanović, **Dejan Milenković**, Zoran Marković, K. Tamilarasan, E. Kavitha, S. Sudha, Vibrational spectroscopic studies (FTIR and FT-Raman) and molecular dynamics analysis of industry inspired 3-amino-4-hydroxybenzene sulfonic acid, *J. Mol. Struc.*, **2020,** *1205*, 127579; DOI: https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2019.127579

ИФ: 3.196 (2020)
Област: Chemistry, Physical
Цитираност (без аутоцитата): 8 (Scopus)
Број аутора: 7
M22 = 5

2.22. Dušan Dimić, Žiko Milanović, Goran Jovanović, Dragana Sretenović, **Dejan Milenković**, Zoran Marković, Jasmina Dimitric Marković, Comparative Antiradical Activity and Molecular Docking/Dynamics Analysis of Octopamine and

Norepinephrine: the Role of OH Groups, *Comput. Bio. Chem.*, **2020**, *84*, 107170; DOI: https://doi.org/10.1016/j.compbiolchem.2019.107170

ИФ: 2.877 (2020)
Област: Computer Science, Interdisciplinary Applications
Цитираност (без аутоцитата): 23 (Scopus)
Број аутора: 7
M22 = 5/(1+0.2*(7-5)) = 3.57

2.23. *D. Ramarajan, K. Tamilarasan, **Dejan Milenković**, Zoran Marković, S. Sudha, P. Subhapriya, Experimental and theoretical investigations of an organic nonlinear optical material *p*-toluidinium picrate – A comparative study, *J. Mol. Struc.*, **2019**, *1195*, 73-84; DOI: https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2019.05.094

ИФ: 2.463 (2019)
Област: Chemistry, Physical
Цитираност (без аутоцитата): 3 (Scopus)
Број аутора: 6
M22 = 5

Радови у међународном часопису (M23 = 3; 2×3 =6)

2.24. *Jelena Đorović, **Dejan Milenković**, Ljubinka Joksović, Milan Joksović, Zoran Marković, Study of Influence of Free Radical Species on Antioxidant Activity of Selected 1,2,4-Triazole-3-thiones, *ChemistrySelect*, **2019**, *4*, 7476–7485; DOI: https://doi.org/10.1002/slct.201900895

ИФ: 1.811 (2018)
Област: Chemistry, Multidisciplinary
Цитираност (без аутоцитата): 3 (Scopus)
Број аутора: 5
M23 = 3

2.25. *Dušan Dimić, **Dejan Milenković,** Zoran Marković, Jasmina Dimitrić Marković, The reactivity of dopamine precursors and metabolites towards $ABTS^{\bullet-}$: an experimental and theoretical study, *J. Serb.Chem.Soc.*, **2019**, *84* ,1–13, https://doi.org/10.2298/JSC190430050D

ИФ: 1.097 (2019)
Област: Chemistry, Multidisciplinary
Цитираност (без аутоцитата): 5 (Scopus)
Број аутора: 4
M23 = 3

Радови у националном часопису међународног значаја (M24 = 2; 3×2=6)

2.26. Ana Amić, **Dejan Milenković**, Jasmina Dimitrić Marković, Zoran Marković, Do Equol's C-ring Hydrogens Contribute to Free Radical Scavenging? *J. Serb. Soc. Comput. Mech.*, **2020**, *Special issue 2020*, 45-58; DOI: https://doi.org/10.24874/jsscm.2020.01.05

ИФ: /
Област: Mehanika
Цитираност (без аутоцитата): 2 (Scopus)
Број аутора: 4
M24 = 2

2.27. Žiko Milanović, Marko Antonijević, Jelena Đorović, **Dejan Milenković**, Comparative Antiradical Activity and Molecular Docking Study of Bergaptol and Xanthotoxol *J. Serb. Soc. Comput. Mech.*, **2020**, *Special issue 2020*, 71-84; DOI: https://doi.org/10.24874/jsscm.2020.01.07

ИФ: /
Област: Mehanika
Цитираност (без аутоцитата): 0 (Scopus)
Број аутора: 4
M24 = 2

2.28. **Dejan Milenković,** Jelena Djorović, Edina H. Avdović, Marko Antonijević, Thermodynamic and Kinetic Investigation of Antiradical Potential of Cyanidin, *J. Serb. Soc. Comput. Mech.*, **2020**, *Special issue 2020*, 85-95; DOI: https://doi.org/10.24874/jsscm.2020.01.08

ИФ: /
Област: Mehanika
Цитираност (без аутоцитата): 0 (Scopus)
Број аутора: 4
M24 = 2

3. Зборници међународних научних скупова (M30)

Од претходног избора: M30 =17.5

Радови саопштени на скупу међународног значаја, штампани у целини (M33 = 1; 14×1 =14)

3.1. Žiko Milanović, Jelena Đorović Jovanović**, Dejan Milenković**, Zoran Marković, Application of molecular modeling for predicting new structures of potential drugs; 1st Serbian International Conference on Applied Artificial Intelligence (SICAAI) Kragujevac, Serbia, 2022, 1-4. ISBN: 978-86-81037-71-3.

3.2. **Dejan A. Milenković**, Marko N. Živanović, Milan S. Dekić, Marijana Stanojević Pirković, Jelena R. Đorović Jovanović, Cytotoxic Activity and Molecular Docking Study of 4-substituted flavylium salt, 1st International Conference on Chemo and BioInformatics, Kragujevac, Serbia, 2021, 466-469, DOI: 10.46793/ICCBI21.466M.

3.3. Jelena R. Đorović Jovanović, Dušan S. Dimić, Marijana S. Stanojević Pirković, Svetlana R. Jeremić, **Dejan A. Milenković**, Molecular Docking Analyses of Some Cyclohexadiene Derivatives, 1st International Conference on Chemo and BioInformatics, Kragujevac, Serbia, 2021, 423-426. DOI: 10.46793/ICCBI21.423DJ.

3.4. Dušan S. Dimić, **Dejan A. Milenković**, Edina H. Avdović, Goran N. Kaluđerović, Jasmina M. Dimitrić Marković, Molecular docking and molecular dynamics studies of the interaction between coumarin-neurotransmitter derivatives and carbonic anhydrase IX, 1st International Conference on Chemo and BioInformatics, Kragujevac, Serbia, 2021, 56-59. DOI: 10.46793/ICCBI21.056D.

3.5. Dušan Dimić, Aleksandra Rakić, Jasmina Dimitrić Marković, **Dejan Milenković**, Zoran Marković, Toxicity, Structural Analysis, and Molecular Docking Studies of Selected Isonicotinohydrazide Analogs, 21st IEEE International Conference on BioInformatics and BioEngineering, Kragujevac, Serbia, 2021. ISBN: 978-86-81037-69-0.

3.6. Marko Antonijević, Dušica Simijonović, **Dejan Milenković**, Zoran Marković, Molecular Docking Study of Coumarin-hydroxybenzohydrazide Hybrid as an Inhibitor of Carbonic Anhydrases IX and XII, 21st IEEE International Conference on BioInformatics and BioEngineering, Kragujevac, Serbia, 2021. ISBN: 978-86-81037-69-0.

3.7. Ana Amić, **Dejan Milenković**, Jasmina M. Dimitrić Marković, Zoran Marković, Free radical scavenging potency of equol, 15th International Conference of Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry, Belgrade, Serbia, 2021, 129-131. ISBN: 978-86-82475-38-5.

3.8. Jelena Đorović Jovanović, **Dejan Milenković**, Žiko Milanović, Zoran Marković, Antiradical potency of cynodontin toward hydroxyl radical, 15th International Conference of Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry, Belgrade, Serbia, 2021, 347-350. ISBN: 978-86-82475-39-2.

3.9. Zoran Marković, **Dejan Milenković** , Jelena Đorović Jovanović, Edina Avdović, Marko Antonijević, Žiko Milanović, Antiradical activity of folic acid towards $^{\bullet}OH$ and $^{\bullet}OOH$ radicals, 15th International Conference of Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry, Belgrade, Serbia, 2021, 351-353. ISBN: 978-86-82475-39-2.

3.10. Ana Kesić, **Dejan Milenković**, Marko Antonijević, Biljana Petrović, Zoran Marković, Molecular docking study on the interaction of Rhodopsin-like receptor with tetra-coordinated gold(III) complex, 1st International Electronic Conference on Biomedicine, 2021, 1-7. DOI: 10.3390/ECB2021-10264.

3.11. Marko Antonijević, Jelena Đorović Jovanović, Žiko Milanović, Edina Avdović**,** **Dejan Milenković,** Dušica Simijonović, Zorica Petrović, Zoran Marković, Antiradical activity of *N'*-(1-(2,4-dioxochroman-3-yl)ethyl)-4-hydroxybenzohydrazide-thermodynamic DFT study, 24th International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry, 2020, 1-10. DOI: 10.3390/ecsoc-24-08372.

3.12. Žiko Milanović, Marko Antonijević, Jelena Đorović Jovanović, Edina Avdović**,** **Dejan Milenković,** Zoran Marković, Influence of nonpolar medium on antioxidant capacity of bergaptol and xanthotoxol - kinetic DFT study, The 24th International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry, 2020, 1-9. DOI: 10.3390/ecsoc-24-08100.

3.13. *Petar Stanić, Marija Živković, Zoran Marković, **Dejan Milenković**, Biljana M. Smit, Formation of amino acid derived 2-thiohydantoins - An experimental and theoretical study, The 23rd International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry (ECSOC-23,November-December 15.11-15.12. 2019, 1-10. DOI: 10.3390/ecsoc-23-06696.

3.14. *Jelena Đorović, Svetlana Jeremić, Nedeljko Manojlović, **Dejan. Milenković**, Zoran Marković, Antioxidative capacity of evernic acid and its interactions with TDP1, 2019 IEEE 19th International Conference on Bioinformatics and Bioengineering (BIBE), Athens, Greece, October 28-30, 2019, 56-59. DOI: 10.1109/BIBE.2019.00019

Радови саопштени на скупу међународног значаја, штампани у изводу (M34 = 0,5; 7×0,5 =3.5)

3.15. Zoran S. Marković, **Dejan Milenković,** Dušica Simijonović, Dušan Dimić, Edina Avdović, Spectroscopic characterization (Nuclear magnetic resonance and infrared) and quantum mechanical studies of 5-(4-hydroxy-3-methoxybenzylidene)pyrimidine 2,4,6(1H,3H,5H)-trione, 14th Conference of the Society of Physicists of Macedonia, Ohrid, Republic North Macedonia, 15–18 September, 2022, Ohrid, Republic North Macedonia.

3.16. Žiko Milanović, Marko Antonijević, Edina Avdović**, Dejan Milenković**, Zoran Marković, Time Dependent Density Functional Theory simulation of the UV-Vis absorption spectra of 4,7-dihydroxycoumarin derivatives, 14th Conference of the Society of Physicists of Macedonia, 15–18 September, 2022, Ohrid, Republic North Macedonia.

3.17. Žiko Milanović, Ana Kesić, **Dejan Milenković,** Edina Avdović, Zoran Marković, Inhibitor potential of some Au(III) complexes against SARS-CoV-2 Spike Glycoprotein: A Molecular Docking Study, Belgrade BioInformatics Conference 2021, 21-25 June 2021, Vinča, Serbia; ISSN 2334 – 6590.

3.18. Marko Antonijević, Ana Kesić, **Dejan Milenković,** Jelena Đorović Jovanović**,** Zoran Marković, In silico study of some tetra- and penta-coordinated gold(III) complexes as potential inhibitors of SARS-CoV-2 main protease, Belgrade BioInformatics Conference 2021, 21-25 June 2021, Vinča, Serbia; ISSN 2334 – 6590.

3.19. Ana Amić, **Dejan Milenković,** Jasmina Dimitrić Marković, Zoran Marković, Contribution of c-ring hydrogens to free radical scavenging by equal, The 32nd International Course and Conference on the Interfaces among Mathematics, Chemistry and Computer Sciences (Math/Chem/Comp, MC^2-32), June 07–11, 2021, Dubrovnik, Croatia. ISBN: 978-953-8334-02-3

3.20. Jelena Đorović Jovanović, Marko Antonijević, Žiko Milanović, Edina Avdović, **Dejan Milenković,** Ana Amić, Marijana Stanojević-Pirković, Zoran Marković, Potential antioxidative and inhibitory activity of parietin, 6th International Electronic Conference on Medicinal Chemistry, 2020, DOI: 10.3390/ECMC2020-07297.

3.21. **Dejan A. Milenković**, Dušan S. Dimić, Edina H. Avdović, Jelena R. Đorović Jovanović, Žiko B. Milanović, Marko R. Antonijević, Jasmina M. Dimitrić-Marković , Zoran S. Marković, Neurotransmitter-coumarin derivatives as potential SARS-CoV-2 main protease inhibitors, 6th International Electronic Conference on Medicinal Chemistry, 2020, DOI: 10.3390/ECMC2020-07308.

4. Предавања по позиву на скуповима националног значаја (M60)

Од претходног избора: M60 =2.8

Радови саопштени на скупу националног значаја, штампани у целини (M63 = 1; 2×1 =2)

4.1. Žiko Milanović, Marko Antonijević, Svetlana Jeremić, Jelena Đorović Jovanović, **Dejan Milenković**; Napredni procesi oksidacije hlorfenolnih jedinjenja iz otpadnih voda-kinetička DFT studija; *XXVII Savetovanje o biotehnologiji*, Čačak, Srbija, 2022, str. 321. ISBN: 978-86-87611-86-3. DOI: 10.46793/SBT27.321M.

4.2. Marko Antonijević, Jelena Đorović Jovanović, Ana Kesić, **Dejan Milenković,** Zoran Marković, Kompleksi zlata kao potencijalni suplementi sa antikancerogenim i antivirusnim delovanjem, XXVI Savetovanje o biotehnologiji, Čačak, Srbija, 2021, str. 481. ISBN: 978-86-87611-80-1. DOI: 10.46793/SBT26.429A.

Радови саопштени на скупу националног значаја, штампани у изводу (M64 = 0.2; 4×0.2 =0.8)

4.3. Edina H. Avdović, **Dejan Milenković**, Sinteza i *in silico* studija potencijalnih antikancer agenasa, Treći Kongres biologa Srbije, Zlatibor, Srbija, p.17, ISBN 978-86-81413-09-8.

4.4. Marko Antonijević, Žiko Milanović, **Dejan Milenković**, Dušica Simijonović, Zoran Marković; Inhibitorna aktivnost prirodnih i sintetičkih derivata kumarina prema α-glukozidazi; Treći kongres biologa Srbije, Srpsko biološko društvo, Zlatibor, Srbija, 2022, str. 25. ISBN: 978-86-81413-09-8.

4.5. Edina Avdović, Krešimir Molčanov, Žiko Milanović, Marko Antonijević, Dušica Simjonović, **Dejan Milenković,** Zoran Marković, Synthesis and crystal structure (E)-3-(1-((4-hydroxy-3-methoxyphenyl)amino)-ethylidene) chromane-2,4-dione. 27th Conference of Serbian crystallographic society, Kragujevac, Serbia, 2021, p.33, ISBN: 978-86-6009-085-2.

4.6. Žiko Milanović, Dušan Dimić, Ana Kesić, **Dejan Milenković**; Substituent effect on the binding mode and toxicity of selected 1,4-benzodiazepin-2-one; 8th International Congress of Serbian Society of Mechanics. Kragujevac, Serbia, 2021, p.253-254, ISBN: 978-86-909973-8-1.

Укупно од избора: M = M13 + M21 + M22 + M23 + M24 + M30 + M60= 185.92

Укупан ИФ од избора: 140.4

(Б) Радови пре претходног избора у звање

** је означен рад из 2015. године, објављен након избора у звање научни сарадник (одлука је донета 26. фебруара 2015. године)

1. Радови објављени у међународним часописима; научна критика, уређивање часописа

Пре претходног избора: М20 = 114.25
Пре претходног избора ИФ = 55.85

Радови у међународном часопису изузетних вредности (М21а = 10; 3×10 + 1×8.33 =38.33)

1.1. Ana Amić, Zoran Marković, Erik Klein, Jasmina M. Dimitrić Marković, **Dejan Milenković**, Theoretical study of the thermodynamics of the mechanisms underlying antiradical activity of cinnamic acid derivatives, *Food Chem.*, **2018**, *246*, 481-489; DOI: https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2017.11.100

ИФ: 4.946 (2017)
Област: Chemistry, Applied
Цитираност (без аутоцитата): 2 (Scopus)
Број аутора: 5
М21а = 10

1.2. Jasmina M. Dimitrić Marković, Boris Pejin, **Dejan Milenković**, Dragan Amić, Nebojša Begović, Miloš Mojović, Zoran S. Marković, Antiradical activity of delphinidin, pelargonidin and malvin towards hydroxyl and nitric oxide radicals: The energy requirements calculations as a prediction of the possible antiradical mechanisms, *Food Chem.*, **2017**, *218*, 440-446; DOI: https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2016.09.106.

ИФ: 4.946 (2017)
Област: Chemistry, Applied
Цитираност (без аутоцитата): 5 (Scopus)
Број аутора: 7
М21а = 10

1.3. Jelena Tošović, Svetlana Marković, Jasmina M. Dimitrić Marković, Miloš Mojović, **Dejan Milenković,** Antioxidative mechanisms in chlorogenic acid, *Food Chem.*, **2017**, *237*, 390-398; DOI: https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2017.05.080.

ИФ: 4.946 (2017)
Област: Chemistry, Applied
Цитираност (без аутоцитата): 13 (Scopus)

Број аутора: 5
M21a = 10

1.4. Milan Dekić, Rejhana Kolašinac, Niko Radulović, Biljana Šmit, Dragan Amić, Krešimir Molčanović, **Dejan Milenković**, Zoran Marković, Synthesis and theoretical investigation of some new 4-substituted flavylium salts, *Food Chem*., **2017**, 229, 688–694; DOI: https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2017.02.139

ИФ: 4.946 (2017)
Област: Chemistry, Applied
Цитираност (без аутоцитата): 13 (Scopus)
Број аутора: 8
M21a = 10/(1+0.2(8-7)) = 8.33

Радови у истакнутом међународном часопису (M21 = 8; 3×8 + 5=29)

1.5. Edina H. Avdović, **Dejan Milenković,** Jasmina M. Dimitrić Marković, Jelena Đorović, Nenad Vuković, Milena D. Vukić, Verica V. Jevtić, Srećko R. Trifunović, Ivan Potočňák, Zoran Marković**,** Spectroscopic characterization (FT-IR, FT-Raman, and NMR), quantum chemical studies and molecular docking of 3-(1-(phenylamino) ethylidene)-chroman-2,4-dione, *Spectrochim. Acta*. A, **2018**, *195*, 31-40; OI: https://doi.org/10.1016/j.saa.2018.01.023

ИФ: 2.931 (2018)
Област: Spectroscopy
Цитираност (без аутоцитата): 5 (Scopus)
Број аутора: 10
M21 = 8/(1+0.2(10-7)) = 5

1.6. Dušan Dimić, **Dejan Milenković**, Jelica Ilić, Biljana Šmit, Ana Amić, Zoran Marković, Jasmina Dimitrić Marković, Experimental and theoretical elucidation of structural and antioxidant properties of vanillylmandelic acid and its carboxylate, *Spectrochim. Acta. A*, **2018**,*198*, 61-70; DOI: https://doi.org/10.1016/j.saa.2018.02.063

ИФ: 2.931 (2018)
Област: Spectroscopy
Цитираност (без аутоцитата): 2 (Scopus)
Број аутора: 7
M21 = 8

1.7. Dušan Dimić, **Dejan Milenković,** Zoran Marković, Jasmina Dimitrić Marković, The Antiradical Activity of Catecholamines and Metabolites of Dopamine: Theoretical and Experimental Study, *Phys. Chem. Chem. Phys*., **2017**, *19*, 12970-12980; DOI: https://doi.org/10.1039/C7CP01716B

ИФ: 4.449 (2015)
Област: Physics, Atomic, Molecular & Chemical
Цитираност (без аутоцитата): 7 (Scopus)
Број аутора: 4
M21 = 8

1.8. **Biljana M. Šmit, Radoslav Z. Pavlović, **Dejan A. Milenković**, Zoran S. Marković (2015, Received: 08 July 2015, Accepted: 12 September 2015, Published: 07 October 2015) Mechanism, kinetics and selectivity of selenocyclization of 5-alkenyl hydantoins: experimental and computational study, *Beilstein J. Org. Chem.*, 2015, *11*, 1865–1875; DOI: https://doi.org/10.3762/bjoc.11.200

ИФ: 2.820 (2013)
Област: Chemistry, Organic
Цитираност (без аутоцитата): 2 (Scopus)
Број аутора: 4
M21 = 8

Радови у истакнутом међународном часопису (M22 = 5; 5×5 + 1×4.17 + 1×3.13=32.20)

1.9. Višnja Stepanić, Sara Matić, Ana Amić, Bono Lucic, **Dejan Milenković,** Zoran Marković, Effects of conjugation metabolism on radical scavenging and transport properties of quercetin – in silico study, *J. Mol. Model. Graph.*, **2019**, *86*, 278-285; DOI:
https://doi.org/10.1016/j.jmgm.2018.10.023

ИФ: 1.885 (2017)
Област: Computer Science, Interdisciplinary Applications
Цитираност (без аутоцитата): 0 (Scopus)
Број аутора: 5
M22 = 5

1.10. Edina H. Avdović, Danijela Lj. Stojković, Verica V. Jevtić, **Dejan Milenković,** Zoran S. Marković, Nenad Vuković, Ivan Potočňák, Ivana D. Radojević, Ljiljana R. Čomić, Srećko R. Trifunović, Preparation and antimicrobial activity of a new palladium(II) complexes with a coumarin-derived ligands. Crystal structures of the 3-(1-(*o*-toluidino)ethylidene)-chroman-2,4-dione and 3-(1-(*m*-toluidino) ethylidene)-chroman-2,4-dione, *Inorg. Chim. Acta.*, **2019**, *484*, 52-59; DOI: https://doi.org/10.1016/j.ica.2018.09.014

ИФ: 2.433 (2018)
Област: Chemistry, Inorganic & Nuclear
Цитираност (без аутоцитата): 0 (Scopus)
Број аутора: 10

M22 = 5/(1+0.2(10-7)) = 3.13

1.11. Ana Amić, Zoran Marković, Jasmina M. Dimitrić Marković, **Dejan Milenković,** Bono Lučić, The role of guaiacyl moiety in free radical scavenging by 3,5-dihydroxy-4-methoxybenzyl alcohol: Thermodynamics of $3H^+/3e^-$ mechanisms, *Mol. Phys.*, **2017**, *207*, 21; DOI: https://doi.org/10.1080/00268976.2018.1506174

ИФ: 1.870 (2016)
Област: Physics, Atomic, Molecular & Chemical
Цитираност (без аутоцитата): 0 (Scopus)
Број аутора: 5
M22 = 5

1.12. **Dejan Milenković**, Jelena Đorović, Svetlana Jeremić, Jasmina M. Dimitrić Marković, Edina H. Avdović, Zoran Marković, Free radical scavenging potency of dihydroxybenzoic acids, *J. Chem-NY.*, **2017**, *2017*; DOI: https://doi.org/10.1155/2017/5936239

ИФ: 1.726 (2017)
Област: Chemistry, Multidisciplinary
Цитираност (без аутоцитата): 4 (Scopus)
Број аутора: 6
M22 = 5/(1+0.2(6-5)) = 4.17

1.13. Dušan Dimić, **Dejan Milenković,** Zoran Marković, Jasmina Dimitrić Marković, Structural and spectral analysis of 3-metoxytyramine, an important metabolite of dopamine, *J. Mol. Struc.*, **2017,** *1134*, 226–236; DOI: https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2016.12.082

ИФ: 2.011 (2017)
Област: Chemistry, Physical
Цитираност (без аутоцитата): 4 (Scopus)
Број аутора: 4
M22 = 5

1.14. Edina H. Avdović, **Dejan Milenković,** Jasmina M. Dimitrić-Marković, Nenad Vuković, Srećko R. Trifunović**,** Zoran Marković, Structural, spectral and NBO analysis of 3-(1-(3-hydroxypropylamino)ethylidene)chroman-2,4-dione, *J. Mol. Struc.*, **2017**, *1147*, 69-75; DOI: https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2017.06.094

ИФ: 2.011 (2017)
Област: Chemistry, Physical
Цитираност (без аутоцитата): 6 (Scopus)
Број аутора: 6
M22 = 5

1.15. Dušan S. Dimić, **Dejan A. Milenković**, Jasmina M. Dimitrić Marković, Zoran S. Marković, Thermodynamic and Kinetic Analysis of the Reaction between Biological Catecholamines and Chlorinated Methylperoxy Radicals, *Mol. Phys.*, 2017, 1166-1178; DOI: https://doi.org/10.1080/00268976.2017.1414967

ИФ: 1.870 (2016)
Област: Physics, Atomic, Molecular & Chemical
Цитираност (без аутоцитата): 3 (Scopus)
Број аутора: 4
M22 = 5

Радови у међународном часопису (M23 = 3; 2×3 + 2×2.14 + 2.55 + 1.88=14.71)

1.16. **Dejan Milenković,** Jasmina Dimitrić Marković, Dušan Dimić, Svetlana Jeremić, Dragan Amić, Marijana Stanojević Pirković, Zoran S Marković, Structural characterization of kaempferol: spectroscopic and computational study, *Maced. J. Chem. En.*, **2019**, *38*, 49–62; DOI: https://doi.org/10.20450/mjcce.2019.1333

ИФ: 0.391 (2017)
Област: Chemistry, Multidisciplinary
Цитираност (без аутоцитата): 0 (Scopus)
Број аутора: 7
M23 = 3/(1+0.2(7-5)) = 2.14

1.17. Zoran Marković, Miloš Filipović,·Nedeljko Manojlović, Ana Amić, Svetlana Jeremić, **Dejan Milenković,** QSAR of the free radical scavenging potency of selected hydroxyanthraquinones, *Chem. Pap.*, **2018**, *72*, 2785–2793; DOI: https://doi.org/10.1007/s11696-018-0534-3

ИФ: 1.258 (2016)
Област: Chemistry, Multidisciplinary
Цитираност (без аутоцитата): 0 (Scopus)
Број аутора: 6
M23 = 3/(1+0.2(6-5)) = 2.55

1.18. **Dejan Milenković,** Jelena Đorović, Vladimir Petrović, Edina Avdović, Zoran Marković, Hydrogen atom transfer versus proton coupled electron transfer mechanism of gallic acid with different peroxy radicals, *Reac. Kinet. Mech. Cat.*, **2018**, *123*, 215–230; DOI: https://doi.org/10.1007/s11144-017-1286-8

ИФ: 1.515 (2017)
Област: Chemistry, Physical
Цитираност (без аутоцитата): 3 (Scopus)
Број аутора: 5
M23 = 3

1.19. **Dejan Milenković,** Edina H. Avdović, Dušan Dimić, Zoran Bajin, Branko Ristić, Nenad Vuković, Srećko R. Trifunović, Zoran S. Marković, Reactivity of the Coumarine Derivative towards Cartilage Proteins: Combined NBO, QTAIM and Molecular Docking study, *Monatsh. Chem.*, **2018**, *49*, 159–166; DOI: https://doi.org/10.1007/s00706-017-2051-4

ИФ: 1.501 (2018)
Област: Chemistry, Multidisciplinary
Цитираност (без аутоцитата): 1 (Scopus)
Број аутора: 8
M23 = 3/(1+0.2(8-5)) = 1.88

1.20. Nevena Ivanović, Ljiljana Jovanović, Zoran Marković, Violeta Marković, Milan D. Joksović, **Dejan Milenković**, Predrag T. Djurdjević, Andrija Ćirić, Ljubinka Joksović, Potent 1,2,4-triazole-3-thione radical scavengers derived from phenolic acids: Synthesis, electrochemistry, and theoretical study, *ChemistrySelect*, **2016,** *1***,** 3870–3878; DOI: https://doi.org/10.1002/slct.201600738

ИФ: 1.505 (2017)
Област: Chemistry, Multidisciplinary
Цитираност (без аутоцитата): 4 (Scopus)
Број аутора: 9
M23 = 3/(1+0.2(9-7)) = 2.14

1.21. Zoran Marković, Jelena Tošović, **Dejan Milenković,** Svetlana Marković, Revisiting the solvation enthalpies and free energies of the proton and electron in various solvents, *Comput. Theor. Chem.*, **201**6, *1077*, 11-17; DOI: https://doi.org/10.1016/j.comptc.2015.09.007

ИФ: 1.549 (2015)
Област: Chemistry, Physical
Цитираност (без аутоцитата): 26 (Scopus)
Број аутора: 4
M23 = 3

2. Зборници међународних научних скупова (M30)

Пре претходног избора: M30 =11.5

Радови саопштени на скупу међународног значаја, штампани у целини (M33 = 8; 8×1 =8)

2.1.**J. R. Đorović, **D. A. Milenković**, Z. S. Marković, Study of electron transfer mechanism of gallic acid, 15th IEEE International Conference on BioInformatics and BioEngineering, Belgrade 2015.

2.2**.**D. A. Milenković**, J. Dimitrić-Marković, Z. Markovć, DFT investigation of the reaction of cyanidin with hydroxyl radical, 15th IEEE International Conference on BioInformatics and BioEngineering, Belgrade 2015 (усмено излагање рада).

2.3. 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 of Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry, Belgrade 2016, 431- 434.

2.4. D. Dimić, **D. Milenković**, Z. Marković, J. Dimitrić Marković, Conformational and vibrational analysis of 3-methoxytyramine, 13th International Conference of Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry, Belgrade 2016, 143-146.

2.5. **D. Milenković**, Z. Marković, S. Jeremić, D. Dimić, J. Dimitrić Marković, Vibrational spectroscopic analysis of kaempferol: a combined experimental and theoretical study, 13th International Conference of Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry, Belgrade 2016, 131-134.

2.6. J. Djorovic, Z. Marković, S. Jeremić, **D. Milenković,** Investigation of the antioxidative and radical scavenging activities of 2,4-, 2,5-, 3,5-dihydroxybenzoic acids, 2nd EAI International Conference on Future Access Enablers of Ubiquitous and Intelligent Infrastructures (Fabolous 2016), Belgrade 2016.

2.7. **D. Milenković**, S. Trifunović, E. Avdović, N. Vuković, M. Vukić, J.Dimitrić-Marković, Z. Marković, Experimental and theoretical study of the UV-Vis spectrum of a new coumarine-derived ligand, 2nd EAI International Conference on Future Access Enablers of Ubiquitous and Intelligent Infrastructures (Fabolous 2016), Belgrade 2016. (усмено излагање рада).

2.8. Z. Marković, J.Đorović, **D.Milenković**, S. Jeremić, Lj. Joksović and A. Amić; Antiradical activity of selected triazole compounds, 14th International Conference of Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry, September 24-28,2018, Belgrade, Serbia, 121- 124.

Радови саопштени на скупу међународног значаја, штампани у изводу (M34 = 0,5; 7×0,5 =3.5)

2.9. J. Đorović, **D. Milenković**, Z. Marković, Z. Petrović, D. Simijonović, V. Petrović; UV-VIS spectra of some phenolic SchIFf bases: experimental and theoretical study; Math/Chem/Comp 2016, 28th MC2 Conference, 20–26 June, Dubrovnik 2016, Croatia.

2.10. Ž. Milanović, **D. Milenković**, Z. Marković, Comparative Study of Antioxidant Activities of Catechol, Protocatechuic Acid and 3,4-Dyhydroxypiridine, 4th South-East European Conference on Computational Mechanics, July 03-04, 2017, Kragujevac, Serbia.

2.11. E. Avdović, S. Trifunović, **D. Milenković**, Z. Dolićanin, M. Stanojević Pirković, Z. Marković, Computational Molecular Docking Studies of the Novel Coumarine Derivative Towards UbiquinolCytochrome C Reductase Binding Protein and Methylenetetrahydrofolate Reductase, 4th South-East European Conference on Computational Mechanics, July 03-04, 2017, Kragujevac, Serbia.

2.12. 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, July 03-04, 2017, Kragujevac, Serbia.

2.13. M. Stanojević Pirković, S. Jeremić, J. M. Dimitrić Marković, D. Dimić, D. Amić, **D. Milenković,** Computational Molecular Docking Studies of Kaempferol-Procalcitonin Interaction, 4th South-East European Conference on Computational Mechanics, July 03-04, 2017, Kragujevac, Serbia.

2.14. E. Avdović, D. Milenković, J. M. Dimitrić Marković, S. R. Trifunović, **Z. Marković**; Molecular docking study on the interaction of human procalcitonin with 3-(1-(2-mercaptoethylamino) ethylidene)-chroman-2,4-dion, Belgrade BioInformatics Conference 2018 (BELBI2018), June 18-22, 2018, Belgrade, Serbia.

2.15. A. Amić, Z. Marković, J. M. Dimitrić Marković, J. Đorović, S. Jeremić, D. Milenković; The role of catechol moiety in free radical scavenging by simple hydroxybenzoic acids, XII Savjetovanje hemičara, tehnologa i ekologa Republike Srpske, November,02-03.2018, Teslić, Republika Srpska.

3. Радови у часопису националног значаја (M50)

Радови у истакнутом националном часопису (M52 = 1.5; 1×1.5 =1.5)

3.1. Jelena Tošović, Svetlana Marković, **Deja Milenković**, Zoran Marković, Solvation Enthalpies and Gibbs Energies of the Proton and Electron – Influence of Solvation Models, J. Serb. Soc. Comput. Mech., **2016**, *10*, 66-76. ISSN: 1820-6530 http://scindeks-clanci.ceon.rs/data/pdf/1820-6530/2016/1820-65301602066T.pdf

Радови у националном часопису (M53 = 1; 1×1 =1)

3.2. **Dejan Milenković**, Jelena Tošović, Svetlana Marković, Zoran Marković, Reakcije prelaza elektrona: Markusova teorija, Hemijski pregled, **2016**, 92-97; ISSN: 04406826

4. Предавања по позиву на скуповима националног значаја (М60)

Пре претходног избора: М60 =2.8

Радови саопштени на скупу националног значаја, штампани у целини (М63 = 0.5; 4×0.5 =2)

4.1. Z. Marković, **D. Milenković**, S. Jeremić, J. Đorović, Examination of electron transfer mechanism of cyanidin, XXI Savetovanje o biotehnologiji, Čačak 2016, 781-786 (усмено излагање рада).

4.2. Z. Marković, S. Jeremić, **D. Milenković**, J. Đorović, QSAR model for predicting antioxidant capacity of some polyphenolic antioxidants, XXI Savetovanje o biotehnologiji, Čačak 2016,775-781.

4.3. Edina Avdović, **Dejan Milenković**, Svetlana Jeremić, Jelena Đorović, Nenad Vuković, Zana Dolićanin, Srećko TrIFunović, Zoran Marković; Ligand-protein interaction of 3-(1-(3-hydroxypropylamino)etylidene)chroman-2,4-dione with human C reactive protein, XXIII Savetovanje o biotehnologiji, Čačak, 09.03-10.03.2018, 403-408.

4.4. Edina Avdović, Svetlana Jeremić, Ana Amić, Marijana Pirković, **Dejan Milenković**, Jelena Đorović, Zoran Marković; Antioxidative and inhibitor activity of alizarin-2-glycoside, XXIII Savetovanje o biotehnologiji, Čačak, 09.03-10.03.2018, 409-414.

Радови саопштени на скупу националног значаја, штампани у изводу (М64 = 0.2; 4×0.2 =0.8)

4.7. Ž. Milanović, **D. Milenković**, Z. Marković, Comparative study of antioxidant activities of trihydroxypyridines and pyrogallol, XXIV Conference of Serbian Crystallographic Society, June 22-24, 2017, Vršac, Serbia.

4.8. J. Đorović, **D. Milenković**, A.Amić, Z. Marković, Radical scavenging potency of anionic species of dihydroxybenzoic acids, XXIV Conference of Serbian Crystallographic Society, June 22-24, 2017, Vršac, Serbia.

4.9. E. Avdović, **D. Milenković**, J. Đorović, M. Živanović, S. Trifunović, Z. Marković; Ispitivanje interakcije između glutation-S-transferaze i 3-(1-(2-hidroksifenilamino)etiliden)-hroman-2,4-diona, Drugi kongres biologa Srbije, Kladovo, Srbija, 25.09-30.09.2018, str.23.

4.10. A. Amić, **D. Milenković**, J. Đorović, S. Jeremić, E. Avdović, Z. Marković, J. Dimitrić Marković, D. Amić, Oksidativni stres – endogena i egzogena zaštita, Drugi kongres biologa Srbije, Kladovo, Srbija, 25.09-30.09.2018, str.266.

Укупно А+Б: М = М13 + М21 + М22 + М23 + М24 + М30 + М50 + М60= 185.92 + 131.1 = 317.02
Укупан ИФ А+Б: 140.4 + 55.85 = 196.25

3. АНАЛИЗА НАУЧНИХ РАДОВА И ДОПРИНОС КАНДИДАТА ЊИХОВОЈ РЕАЛИЗАЦИЈИ

3.1. Анализа пет најзначајнијих научних остварења кандидата од претходног избора у звање

Пет најзначајнијих научних остварења, у изборном периоду, у којима је др Дејан Миленковић остварио кључан допринос и који, поред високог импакт фактора, најбоље одражавају ангажовање кандидата у конципирању истраживања, изради прорачуна, спровођењу одговарајућих методологија, координирању рада чланова тима, прикупљању и обради резултата, прегледу литературе, писању радова и кореспонденцији са уредницима и рецензентима су:

2.3. **Dejan A. Milenković**, Dušan S. Dimić, Edina H. Avdović, Ana D. Amić, Jasmina M. Dimitrić Marković, Zoran S. Marković, Advanced oxidation process of coumarins by hydroxyl radical: Towards the new mechanism leading to less toxic products, *Chem. Eng. J.*, **2020,** *395*, 124971; DOI: https://doi.org/10.1016/j.cej.2020.124971
ИФ: 13.273 (2020)
Област: Engineering, Chemical
Цитираност (без аутоцитата): 43 (Scopus)
Број аутора: 6
M21a = 10

M21a-2.3. Рад је објављен у часопису категорије М21а. У овом раду Др Дејан Миленковић је дао значајан допринос у расветљавању новог механизма антирадикалског деловања деривата кумарина према слободно радикалској врсти (OH радикалу), формирање радикалског производа праћен преносом атома водоника - **RAF-HAA** (Radical adduct formation followed by hydrogen atom abstraction) применом термодинамичког и кинетичког приступа. Предложени механизам је потврђен експериментално помоћу електронске парамагнетне резонантне (EPR)

спектроскопије. ***Кратак опис рада***: Прекомерна употреба кумарина и њихових деривата постала је велики еколошки проблем због њихове токсичности према различитим организмима. Један од могућих начина њиховог уклањања су напредни процеси оксидације. Процес оксидативне разградње 4-хидроксикумарина и његова два деривата, изазван веома моћним оксидантом хидрокси радикалом ($HO^{\bullet}$), испитиван је експериментално и теоријски. У ову сврху, испитан је нови механизам антирадикалског деловања, односно формирање радикалског производа праћен преносом атома водоника (RAF-HAA). Термодинамички и кинетички параметри, израчунати применом теорије прелазног стања за неколико активних положаја, указали су на могућу реакцију у којој се добијају мање токсични производи, што је потврђено проценом екотоксичности. Механизам је укључивао реакција са два $HO^{\bullet}$ и увођење додатне OH групе у структуру молекула. Добијени резултати су упоређени са механизмом који укључује пренос атома водоника на слободно радикалску честицу, HAA механизам. Овај механизам се одвија између OH групе 4-хидроксикумарина и $HO^{\bullet}$. На основу QTAIM и NBO анализа утврђено је да је PCET (купловани пренос протона и електрона) доминантан реакциони пут у овом кораку. Након тога испитан је механизам радикалског куплована додавањем новог $HO^{\bullet}$ и овај процес је праћен кето-енолном таутомеријом, што је довело до формирања стабилног финалног производа, идентичног оном добијеном RAF-HAA механизмом. Константе брзине реакције за RAF-HAA биле су веће у односу на оне добијене за HAA механизам и реакција се одвија брже, што доводи до закључка да би нови предложени механизам могао бити доминантан реакциони пут за разградњу ароматичних молекула у напредним процесима оксидације.

2.7. Petar Stanić, Biljana Šmi, **Dejan Milenković**, Kinetics and mechanism of amino acid derived 2-thiohydanoin formation reactions, *React. Chem. Eng.*, **2023**, *8*, 699-706; DOI: https://doi.org/10.1039/D2RE00423B

ИФ: 5.200 (2021)
Област: Engineering, Chemical
Цитираност (без аутоцитата): 0 (Scopus)
Број аутора: 3
M21 = 8

M21-2.7. Рад је објављен у часопису категорије М21. Рад је проистекао из резултата доктората у коме је кандидат др Дејан Миленковић коментор. У овом раду др Дејан Миленковић је дао значајан допринос у испитивању механизма формирања 2-тиохидантоина. ***Кратак опис рада***: Реакција алил изотиоцијаната са природним аминокиселинама (глицин, L-аланин, L-валин, L-леуцин и L-фенилаланин) је испитивана. ^{1}HNMR спектроскопија је коришћена у циљу карактеризације међупроизвода реакције и да се одреде кинетички параметри. Теорија фунцкионала густине (DFT) је примењена да би се детаљно испитао механизам формирања 2-тиохидантоина испитујући кинетичке параметре, као и за проучавање важних међупроизвода реакције и прелазних стања. Добијени резултати су показали да је процес циклизације кључни корак у настајању 2-тиохидантоина који се одвија кроз нуклеофилни напад у међупроизводу. Теоријски резултати су показали добро слагање са експериментом.

2.14. **Dejan Milenković***, Dušan Dimić, Edina Avdović, Dušica Simijonović, Radiša Vojinović, Zoran Marković, A thermodynamic and kinetic HO radical scavenging study and protein binding of baicalein, *J. Chem. Thermodyn.*, **2023**,*185*, 107110; DOI: https://doi.org/10.1016/j.jct.2023.107110

ИФ: 3.269 (2021)
Област: Chemistry, Physical
Цитираност (без аутоцитата): 0 (Scopus)
Број аутора: 6
M22 = 5/(1+0.2*(6-5)) = 4.17
***Кандидат је био задужен за коресподенцију**

M22-2.14 Рад је објављен у часопису категорије М22. У овом раду др Дејан Миленковић је дао значајан допринос у испитивању механизма антиоксидативног деловања бајкалеина. ***Кратак опис рада***: Бајкалеин (BOH) спада у групу есенцијално важних флавона са израженом антиоксидативном активношћу, иако механизам антиоксидативног деловања до сада није у поптуности испитан. У овом раду су испитана три механизма антиоксидативног деловања бајкалеина: пренос атома водоника - Hydrogen Atom Abstraction (HAA), формирање радикалског производа - Radical Adduct Formation (RAF) и пренос електрона - Electron Transfer (ET) у води и пентилетаноату, као растварачима, применом термодинамичког и

кинетичког приступа. На основу pKa вредности BOH, одређен је проценат различитих киселинско-базних врста. Резултати за промену слободне Гибсове енергије реакције за HAA механизам су показали да се пренос атома водоника са OH групе бајкалеина на хидрокси радикал одвија спонтано. Константе брзине реакције за овај процес су 1.8×10^7 и 7.5×10^4 M^{-1} s^{-1}. Утврђено је да је PCET (купловани пренос протона и електрона) доминантан реакциони пут у овом кораку. Реакција формирања радикалског производа се одвија у шест различитих положаја што су показали термодинамички и кинетички параметри. Константе брзине реакције за RAF механизам се крећу у опсегу од 4.8×10^4 до 3.0×10^8 M^{-1} s^{-1}. Константа брзине реакције за реакцију преноса електрона из анјонске врсте бајкалеина, BO^-, је показала да је то најповољнији реакциони пут, што недвосмислено указује да је ова реакција контролисана дифузијом. Ови резултати отварају нове могућности у хемији бајкалеина и на његову потенцијалну примену у медицини. У овом раду је извршена анализа инхибиторне активности анјона BO^- према Glyoxalase I (GLOI) рецептору. Ова студија је показала да је молекулски докинг важан за процену интеракције биолошки значајних једињења, посебно њихових киселинско-базних облика. У овом раду кандидат је аутор за коресподенцију.

2.19. **Dejan A. Milenković,** Dušan S. Dimić, Edina H. Avdović, Zoran S. Marković, Several coumarin derivatives and their Pd(II) complexes as potential inhibitors of SARS-CoV-2 main protease, *in silico* approach. *RSC Adv.*, **2020**, *10*, 35099-35108; DOI: https://doi.org/10.1039/D0RA07062A
ИФ: 3.361 (2020)
Област: Chemistry, Multidisciplinary
Цитираност (без аутоцитата): 30 (Scopus)
Број аутора: 4
M22 = 5

M22-2.19 Рад је објављен у часопису категорије M22. У овом раду др Дејан Миленковић је дао значајан допринос у испитивању инхибиторне активности деривата кумарина и њихових комплекса са Pd(II) јоном према рецептору SARS-CoV-2 вируса који изазива COVID 19 применом симулације молекулског докинга и молекулске динамике. Резултати ове публикације су привукли велику пажњу како уредништва часописа, тако и читалаца и захваљујући значајном научном доприносу

нашла се на Сајту светске здравствене организације (https://search.bvsalud.org/global-literature-on-novel-coronavirus-2019-ncov/resource/en/covidwho-1221216). ***Кратак опис рада***: Глобална пандемија тешког акутног респираторног синдрома CoronaVirus 2 (SARS-CoV-2) изазвала је много смртних случајева међу људима и значајно утицала на глобалну економију. Пошто ефикасан третман лечења и превенције није доступан, рачунске методе у биологији и хемији су обећавајућа полазна тачка за испитивање потенцијалних лекова. Афинитети везивања три новосинтетисана деривата кумарина и њихових одговарајућих комплекса паладијума(II) су испитани према SARS-CoV-2 M^{pro} протеази применом молекулског докинга и молекулске динамике. Резултати су показали да испитивана кумаринска једињења имају знатно виши афинитет везивања од цинансерина и хлорокина, два лека Управе за храну и лекове (FDA). Сва испитивана једињења везују се за активну место поменутог протеина. Комплекси кумарин-паладијум(II) су показали већи афинитет везивања у поређењу са одобреним лековима. Афинитет везивања бис(3-(1-((3-хлорофенил)амино)етилиден)-хроман-2,4-дион) паладијума(II) комплекса, његовог одговарајућег лиганда и цинансерина за SARS-CoV-2 M^{pro} је даље подвргнуто симулацијама молекуларне динамике. Слободне енергије везивања, израчунате MM/PBSA приступом, су детаљно анализиране и истакнут је значај специфичних интеракција. Резултати ове студије су показали да молекули који имају структурну сличност са одобреним лековима и њихови комплекси метала имају потенцијал да инхибирају функционалну активност SARS-CoV-2 M^{pro} протеазе и да треба предузети даље експерименталне студије.

2.20. **Dejan Milenković*,** Edina Avdović, Dušan Dimić, S. Sudha, D. Ramarajan, Žiko Milanović, Srećko Trifunović, Zoran S. Marković, Vibrational and Hirshfeld surface analyses, quantum chemical calculations, and molecular docking studies of coumarin derivative 3-(1-*m*-toluidinoethylidene)-chromane-2,4-dione and its corresponding palladium(II) complex, *J. Mol. Struc.*, **2020**, *1209*, 127935; DO: https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2020.127935
ИФ: 3.196 (2020)
Област: Chemistry, Physical
Цитираност (без аутоцитата): 33 (Scopus)
Број аутора: 8
M22 = 5/(1+0.2*(8-7)) = 4.17
***Кандидат је био задужен за коресподенцију**

M22-2.20 Рад је објављен у часопису категорије М22. У овом раду др Дејан Миленковић је дао значајан допринос у испитивању вибрационих спектара, структурној карактеризацији и инхибиторној активности 3-(1-*m*-толуидиноетилиден)-хроман-2,4-дион и његовог одговарајућег комплекса паладијума(II) применом теорије функционал густине (DFT) и молекулског докинга. ***Кратак опис рада***: У овом раду извршена је анализа вибрационих спектара и структуре 3-(1-*m*-толуидиноетилиден)-хроман-2,4-дион и његовог одговарајућег комплекса паладијума(II) применом експерименталног приступа. Применом B3LYP-D3BJ/6-311+G(d,p) нивоа теорије симулирани су вибрацини спектри и извршене су QTAIM и NBO анализе, као и Хиршфелд-ова анализа међумолекулских интеракција. Утврђено је веома добро слагање између експерименталног спектара и предвиђеног помоћу DFT методе са високим коефицијентом корелације, 0.999. Испитана је инхибиторна активност једињења према CDK2 тирозин кинази применом молекулског докинга. Утврђено је да комплекс паладијум(II) има већи афинитет везивања за рецептор него лиганд. У овом раду кандидат је аутор за коресподенцију.

3.2 Тематске групе радова:

Радови **M21a-2.1, M21a-2.2, M21a-2.3, M21a-2.4, M21-2.5, M21-2.12, M21-2.13, M22-2.14, M22-2.16, M22-2.22, M23-2.24** и **M23-2.25** се баве испитивањима антиоксидативне активности природних једињења применом термодинамичког и кинетичког приступа. У радовима **M21a-2.1, M21a-2.2,** и **M21a-2.3,** и **M21-2.12** испитани су механизми антирадикалског деловања новосинтетисаних деривата кумарина према слободно радикалским врстама (OH и OOH радикалима). У раду **M21a-2.3** предложен је нови механизам антирадикалског деловања деривата кумарина, **RAF-HAA.** Предложени механизам је испитан и у раду **M21a-2.2**. Радови **M21a-2.4, M21-2.13 и M22-2.16** су резултат мултидисциплинарних истраживања у којима су учествовали иностранi и наши истраживачи. У радовима **M21a-2.4** и **M21-2.13** испитан је антиоксидативни механизам деловања ферулинске киселине и радикала ферулинске киселине према различитим радикалским врстама применом термодинамичког и кинетичког приступа. Ови радови су проистекли из

дугогодишње међународне сарадње др Дејана Миленковића са колегама из Хрватске са Института "Руђер Бошковић" у Загребу и са Универзитета Јосип Јурај Штросмајер у Осјеку. У раду **M22-2.16** испитан је антиоксидативни механизам деловања кемпферола и дихидроксикемпферола према хидропероски радикалу применом термодинамичког и кинетичког приступа. Овај рад је проистекао из дугогодишње међународне сарадње са Универзитетом Јосип Јурај Штросмајер у Осјеку. Допринос кандидата др Дејана Миленковића у овим радовима, у којима није први аутор као ни аутор за коресподенцију, је у осмишљавању рада, у извођењу прорачуна, тумачењу и анализи резултата, као и у креирању и писању методологије и дискусије.

Радови **M21a-2.3** и **M22-2.14** су анализиран у поглављу 3.1.

Радови **M21-2.6, M21-2.9, M21-2.10, M21-2.11, M22-2.15, M22-2.17, M22-18, M22-2.19, M22-2.20, M22-2.21, M22-2.22,** и **M22-2.23** се баве испитивањима спектроскопских и структурних особина природних једињења и њихових комплекса метала (паладијум и рутенијум) применом експерименталног и теоријског приступа (примена нумеричких симулација, DFT методе). Такође је у овим радовима испитана инхибиторна активност природних једињења према одговарајућим протеинима, као и одговарајуће протеин-лиганд интеракције, применом *in silico* приступа, молекулског докинга и молекулске динамике. Радови **M21-2.6** и **M21-11** су резултат мултидисциплинарних истраживања у којима су учествовали иностранi и наши истраживачи. Ови радови су проистекли из међународне сарадње кандидата са са проф. др Гораном Калуђеровићем са Универзитета примењених наука Мерзебургу (University of Applied Sciences Merseburg) у Немачкој. У раду **M21-2.6** испитане су структурне особине и биолошка активност новосинтетисаног бинуклеарног рутенијум(II)-1-нафтилхидразин комплекса. Такође је испитана је инхибиторна активност рутенијум(II) комплекса према говеђем албумин серуму (BSA) применом молекулског докинг и молекулксе динамике. У раду **M21-11** испитане су структурне особине и биолошка активност новосинтетисаног 4-хидроксикумарин-неуротрансмитер деривата. Испитана је инхибиторна активност 4-хидроксикумарин-неуротрансмитер деривата према хуманој карбоанхидрази 9 применом молекулског докинг и молекулске динамике. Допринос кандидата др Дејана Миленковића у овим радовима, у којима није први аутор као ни аутор за

коресподенцију, је у осмишљавању рада, у извођењу прорачуна, тумачењу и анализи резултата, као и у креирању и писању методологије и дискусије.

Радови **M22-2.19** и **M22-2.20** су анализиран у поглављу 3.1.

Рад **M21-2.7** је анализиран у поглављу 3.1.

Рад **M21-2.8** се бави испитивањем токсичности ароматичних једињења применом приступа квантитативни однос структуре и активности (**Q**uantitative **S**tructure–**A**ctivity **R**elationship, **QSAR**). Рад је проистекао из дугогодишње сарадње др Дејана Миленковића са професором Бакхтијором Расулевим са Државног Универзитета, Северна Дакота, Фарго (North Dakota State University-NDSU) где кандидат тренутно борави од 16.05.2023. године до данас као гостујући научник (J-1 Visiting Scientist). Допринос кандидата у овом раду се огледа у осмишљавању рада, у извођењу прорачуна, тумачењу и анализи резултата, као и у креирању и писању методологије и дискусије.

4. Квалитативна оцена научног доприноса:

1. Показатељи успеха у научном раду:

(Награде и признања за научни рад додељене од стране релевантних научних институција и друштава; уводна предавања на научним конференцијама и друга предавања по позиву; чланства у одборима међународних научних конференција; чланства у одборима научних друштава; чланства у уређивачким одборима часописа, уређивање монографија, рецензије научних радова и пројеката).

Чланства у одборима међународних научних конференција

Кандидат др Дејан Миленковић је био председник извршног локалног одбора Прве међународне конференције о хемоинформатици и биоинформатици (ICCBIKG 2021) у организацији Института за информационе технологије Крагујевац (**Прилог 1**). Др Дејан Миленковић је био члан извршног локалног одбора 15-те и 16-те Интернационалне конференције фундаменталних и примењених аспеката Физичке хемије (**Прилози 2 и 3**). Кандидат је био председавајући за секцију хемоинформатика, хемогеномика и молекулски дизајн на Првој међународној конференцији о хемоинформатици и биоинформатици (ICCBIKG 2021) (**Прилог 4**).

Такође, је био председавајући за секцију Спектроскопија, Молекулске структуре и физичка хемија плазме на 16-тој Интернационалној конференцији фундаменталних и примењених аспеката Физичке хемије (**Прилог 5**).

Чланства у уређивачким одборима часописа

Кандидат др Дејан Миленковић је уредник у престижном међународном научном часопису "Journal of Molecular Structure" који је на SCI листи (M22 категорија чији је импакт фактор, ИФ = 3.8 за 2022. годину, **Прилог 6**).

Кандидат др Дејан Миленковић је уредник у престижном међународном научном часопису "Molecules" који је на SCI листи (M22 категорија чији је импакт фактор, ИФ = 4.6 за 2022. годину, **Прилог 7**).

Рецензије научних радова и пројеката

Др Дејан Миленковић је био рецензент радова у следећим међународним научним часописима:

Phytochemistry (M22, $ИФ_{2022}$ = 3.8)
Journal of Molecular Structure (M22, $ИФ_{2022}$ = 3.8)
Journal of Molecular Liquids (M21, $ИФ_{2022}$ = 6)
Journal of Molecular Graphics and Modelling (M22, $ИФ_{2022}$ = 2.9)
Inorganic Chemistry Communications (M22, $ИФ_{2022}$ = 3.8)
Heliyon (M22, $ИФ_{2022}$ = 4)
Food Chemistry (M21a, $ИФ_{2022}$ = 8.8)
ACS Omega (M22, $ИФ_{2022}$ = 4.1)
Biomolecules (M21, $ИФ_{2022}$ = 5.5)
Chemistryselect (M23, $ИФ_{2022}$ = 2.1)
Free Radical Research (M22, $ИФ_{2022}$ = 3.3)
Journal of Biomolecular Structure and Dynamics (M21, $ИФ_{2022}$ = 4.4)
Molecules (M22, $ИФ_{2022}$ = 4.6)
New Journal of Chemistry (M22, $ИФ_{2022}$ = 3.3)

Докази о рецензији од стране кандидата налазе се у форми писама уредника и захвалница дати су у **Прилогу 8.**

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

(Допринос развоју науке у земљи; менторство при изради мастер, магистарских и докторских радова, руковођење специјалистичким радовима; педагошки рад; међународна сарадња; организација научних скупова).

Допринос развоју науке у земљи

Др Дејан Миленковић је ангажован на новооснованом Институту за информационе технологије Крагујевац, Универзитета у Крагујевцу, у Департману за природно-математичке науке, где се активно бави научно-истраживачким радом у области органске физичке хемије, прецизније, бави се испитивањем физичко - хемијских особина различитих природних једињења која имају широку примену у области прехрамбене технологије. Примена антиоксидативних једињења има све већи значај у људској исхрани у циљу спречавања развоја многих болести, као што су канцер, атеросклероза, кардиоваскуларна обољења, итд. Сам механизам деловања антиоксиданата у превенцији још увек није детаљно објашњен. Један од циљева истраживања је, да се применом комплементарних истраживачких приступа, допринесе бољем разумевању структурних и електронских особина природних једињења (полифенола, кумарина и деривата кумарина), као и механизаму антиоксидативног деловања природних једињења: **HAT** (Hydrogen Atom Transfer) - пренос атома водоника; **SPLET** (Sequential Proton Loss Electron Loss) - губитак протона праћен трансфером електрона; **RAF** (Radical adduct formation) - формирање радикалског производа и **SET-PT** (Single Electron Transfer – Proton Transfer) - трансфер електрона праћен трансфером протона). Др Дејан Миленкоић је дао значајан допринос у расветљавању новог механизма антирадикалског деловања деривата кумарина према слободно радикалским врстама (OH и OOH радикалима) применом термодинамичког и кинетичког приступа, **RAF-HAA** (Radical adduct formation followed by hydrogen atom abstraction) - формирање радикалског производа праћен преносом атома водоника. Резултат оваквог приступа води добијању стабилних и мање токсичних производа од полазних једињења. Предложени

механизам је потврђен експериментално помоћу електронске парамагнетне резонантне (EPR) и УВ-Вис спектроскопије. Резултати ових истраживања су објављени у 2020. и 2021. години (**M21a**-2.2 и **M21a**-2.1) у престижном међународном научном часопису на SCI листи "Chemical Engineering Journal" (ИФ=16.744 за 2021. годину). Поред тога, др Дејан Миленковић се бави испитивањима протеин-лиганд интеракција применом симулације молекулског докинга и молекулске динамике. Применом молекулског докинга и молекулске динамике испитана је инхибиторна активност деривата кумарина и њихових комплекса са Pd(II) јоном према рецептору SARS-CoV-2 вируса који изазива COVID 19. Прелиминарни резултати су показали да испитани кумарински деривати и њихови комплекси са Pd(II) имају бољу инхибиторну активност за везивање са рецептором SARS-CoV-2 него стандардни лекови који су одобрени од FDA агенције. Резултати ових истраживања су објављени у 2020. години (**M22**-2.19) у престижном међународном научном часопису на SCI листи "RSC Advances" (ИФ=3.361 за 2020. годину). Као резултат свега рад је проглашен као "**Hot paper**" од стране уредника часописа (**Прилог 9**). Из досадашњих кандидатових истраживања проистекли су радови у врхунским међународним часописима и радови у истакнутим међународним часописима. Др Дејан Миленковић је до сада постигао значајне резултате у научно-истраживачком раду, што је верификовано објављивањем 56 научних радова као први аутор, аутор за коресподенцију и коаутор. Сви радови су објављени у часописима на SCI листи. Објавио је преко 60 саопштења на домаћим и међународним скуповима. Држао је усмена излагања на научним скуповима од међународног и националног значаја. Сви резултати кандидата усмерени су ка расветљавању антиоксидативних механизама различитих природних једињења, испитивању протеин-лиганд интеракција применом *in silico* метода и испитивању квантитативног односа структуре и активности (**Q**uantitative **S**tructure–**A**ctivity **R**elationship, **QSAR**) одабраних природних једињења.

Др Дејан Миленковић је био две године руководилац Департмана за природно-математичке науке на Институту за информационе технологије Крагујевац, Универзитета у Крагујевцу и дао је значајан допринос у развоју научно-истраживачког рада на новооснованом Института (**Прилог 10**). Након истека

мандата као руководиоца Департмана, др Дејан Миленковић је именован за Помоћника директора за научно-истраживачки рад на Институту за информационе технологије Крагујевац (**Прилог 11**).

Учешће у формирању научно-истраживачког подмлатка

Др Дејан Миленковић активно и непосредно учествује у раду са студентима докторских студија. Кандидат је коментор у изради докторске дисертације Петра Станића на Природно-математичком факултету, Универзитета у Крагујевцу (приложене одлуке Наставно–научног већа Природно–математичког факултета Универзитета у Крагујевцу и Већа за Природно–математичке науке Универзитета у Крагујевцу, **Прилози 12 и 13 – докази о коменторству**). Тема докторске дисертације је „Алкенилски и арилиденски 2-тиохидантоини: синтеза, кинетика и механизам настајања, биолошка и електрохемијска евалуација, координациони потенцијал“. Из ове докторске дисертације проистекао је један заједнички рад категорије **М21** (**М21-2.7**) где је кандидат др Дејан Миленковић дао највећи допринос у извођењу прорачуна, анализи и обради добијених резултата, као и у писању рада. Др Дејан Миленковић је био члан у комисији за оцену и одбрану докторске дисертације на Природно-математичком факултету, Универзитета у Крагујевцу кандидата Жике Милановића (приложене одлуке Наставно–научног већа Природно–математичког факултета Универзитета у Крагујевцу и Већа за Природно–математичке науке Универзитета у Крагујевцу, **Прилози 14 и 15**). Тема докторске дисертације др Жике Милановића је била: „Структурне и антиоксидативне особине новосинтетисаних фенолних деривата 4,7-дихидроксикумарина“. Са др Жиком Милановићем, кандидат има 9 објављених научних радова категорије **М20** (**М21-3, М22-2, М22-4, М22-6, М23-3,и М23-4**). Сви наведени подаци, јасно и недвосмислено указују да др Дејан Миленковић има веома изражено учешће у формирању научно-истраживачког подмлатка.

Педагошки рад

Др Дејан Миленковић је од 2021. године до данас ангажован на извођењу наставе на докторским академским студијама Биоижењеринга на Факлутету инжењерских

наука Универзитета у Крагујевцу на предмету ”Молекулски дизајн биоактивних једињења” (**Прилог 16**).

Међународна сарадња

Учешће у међународним пројектима:

2023-2025: Билатерални пројекат СРБИЈА СЛОВЕНИЈА: „Развој компјутерског протокола за процену деривата 4-хидроксикумарин-неуротрансмитера у превенцији Алцхајмерове болести (Development of a computational protocol to evaluate 4-hydroxycoumarin-neurotransmitter derivatives in the treatment of Alzheimer`s disease)“; сарадња између Института за информационе технологије Крагујевац – руководилац пројекта др Дејан Миленковић и National Institute of Chemistry – руководилац пројекта Јанез Конц; Министарство науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије, бр. 337-00-110/2023-05/20.

2021-2022: Balkan-Network у оквиру пројекта DAAD HAW. Руководилац пројекта је проф. др Зоран Марковић

2014-2015: Билатерални пројекат СРБИЈА ФРАНЦУСКА: „Развој теоријских методологија за процену антиоксидативне активности полифенола: пут ка применама у реалном животу (Development of Theoretical Methodology for Polyphenol Antioxidant Evaluation: Towards real-word applications)“; сарадња између Универзитета у Новом Пазару – руководилац пројекта Зоран Марковић и Universite de Limoges – руководилац пројекта Patrick Trouillas; Министарство просвете и науке Р. Србије, бр. 451-03-3455/2013-09/17.

2016-2017: Билатерални пројекат СРБИЈА ХРВАТСКА "Испитивање хемизма и антиоксидативне активности комлекса полифенолних једињења са есенцијалним металима"; Министарство просвете и науке Р. Србије. Руководилац пројекта је проф. др Светлана Марковић.

Др Дејан Миленковић тренутно борави на Државном Универзитету, Северној Дакоти у Фаргу (North Dakota State University-NDSU) од 16.05.2023. године до данас као гостујући научник (J-1 Visiting Scientist). Током свог боравка учествоваће на пар пројеката који су повезани са моделирањем процеса деградације полимерних

материјала, као и испитивањем токсичности органских једињења и развојем метода за предвиђање особина полимерних материјала у групи професора Bakhtiyor Rasuleva (Позивно писмо са NDSU, **Прилог 17**). До сада је сарадња резултирала са једним научним радом категорије **M21 (M21-2.8)**, док су два рада у припреми за публиковање. Др Дејан Миленковић има дугогодишњу сарадњу са Универзитетом Јосип Јурај Штросмајер у Осјеку, Хрватска (радови **M21a-2.4, M21-2.13, M22-2.16** и **M22-2.17**). Од 2021. године је успоставио међународну сарадњу са проф. др Гораном Калуђеровићем са Универзитета примењених наука Мерзебургу (University of Applied Sciences Merseburg) у Немачкој. Са проф. др Гораном Калуђеровићем има објављена 3 заједничка рада категорије **M20** (**M21-2.6, M21-11** и **M22-2.22**). Треба истаћи да је др Дејан Миленковић остварио међународну сарадњу са проф. др Јанезом Концом са Националног института за хемију, Љубљана, Словенија у оквиру заједничког билатералног пројекта, као и са проф. др Бартозом Трзасковским са Универзитета у Варшави, Пољска.

Организација научних скупова

Др Дејан Миленковић је као председник извршног локалног одбора Прве међународне конференције о хемоинформатици и биоинформатици (ICCBIKG 2021) учествовао у организацији конференције:

- 1st International Conference on Chemo and BioInformatics, Kragujevac, Serbia, (2021) October 26-27.

Др Дејан Миленковић је као члан извршног одбора учествовао у организацији две међународне конференције:

- 15th International Conference on Fundamental and Applied aspects of Physical Chemistry, Belgrade, Serbia, (2021) September 20–24.
- 16th International Conference on Fundamental and Applied aspects of Physical Chemistry, Belgrade, Serbia, (2018) 24-28. September 24-28.

Докази су дати у **Прилозима 1, 2 и 3**.

3. Организација научног рада:

(Руковођење пројектима, потпројектима и задацима; технолошки пројекти, патенти, иновације и резултати примењени у пракси; руковођење научним и стручним друштвима; значајне активности у комисијама и телима министарства надлежног за послове науке и технолошког развоја и другим телима везаних за научну делатност; руковођење научним институцијама).

Руковођење пројектима, потпројектима и задацима

Др Дејан Миленковић је руководилац билатералног пројекта СРБИЈА СЛОВЕНИЈА под називом „Развој компјутерског протокола за процену деривата 4-хидроксикумарин-неуротрансмитера у превенцији Алцхајмерове болести (Development of a computational protocol to evaluate 4-hydroxycoumarin-neurotransmitter derivatives in the treatment of Alzheimer`s disease)“, Министарство науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије, број 337-00-110/2023-05/20 (**Прилог 18 – доказ о руковођењу**). Циљ овог пројекта је развој нове методологије засноване на приступу молекулског моделирања за процену потенцијалне активности хибрида 4-хидроксикумарин-неуротрансмитера у превенцији Алцхајмерове болести. Нови протокол ће послужити за објашњење познатих и предвиђање неколико нових механизама повезаних са потенцијалном активношћу проучаваних деривата кумарин-неуротрансмитера у Алцхајмеровој болести.

Др Дејан Миленковић је руководилац пројекта „Антиоксидативни потенцијал новосинтетисаних кумарин *N*-ацилхидразонских деривата“ расписан у оквиру Програма за научноистраживачке односно уметничке пројекте младих истраживача и уметника који се финансирају из средстава Центра за научноистраживачки рад САНУ и Универзитета у Крагујевцу и Универзитета у Крагујевцу, број VI-03-232 (**Прилог 19 – доказ о руковођењу**). Главни циљеви пројекта су синтеза и структурна карактеризација нових кумарин *N*-ацилхидразонских деривата коришћењем различитих експерименталних и теоријских техника, експериментално одређивање антиоксидативног потенцијала ових једињења применом различитих *in vitro* тестова, и примена теоријских метода за утврђивање најповољнијих реакционих механизама антиоксидативног деловања испитиваних једињења.

Руковођење научним институцијама

Др Дејан Миленковић је Помоћник директора за научно-истраживачки рад на Институту за информационе технологије Крагујевац (**Прилог 11**).

4. *Квалитет научних резултата:*

(Утицајност; параметри квалитета часописа и позитивна цитираност кандидатових радова; ефективни број радова и број радова нормиран на основу броја коаутора; степен самосталности и степен учешћа у реализацији радова у научним центрима у земљи и иностранству; допринос кандидата реализацији коауторских радова; значај радова).

Утицајност научних резултата

Утицајност научних резултата др Дејана Миленковића се огледа у квалитету објављених радова. Након избора у научно звање виши научни сарадник, Др Дејан Миленковић је објавио два поглавља категорије **M13** (**M13-1.1**. и **M13-1.2**, **Прилози 20 и 21**) и 28 рада категорије **M20** (**M21a**=4, **M21**=9, **M22**=10, **M23**=2 и **M24**=3). У *Библиографији* дати су радови који јасно указују на значај остварених резултата. Укупан збир импакт фактора ($\Sigma IF_{укупно}$) свих радова до сада публикованих је $\Sigma IF_{укупно}$ = 219.09, што подељено са бројем радова (56) износи просечно 3.91 по раду. Од избора у претходно звање збир импакт фактора је $\Sigma IF_{укупно}$ = 140.4, што подељено са бројем радова (25) износи просечно 5.62 по раду. У периоду од 2011.-2023. године, сви радови Др Дејана Миленковића су цитирани 1232 пута по евиденцији базе Scopus вредност (без аутоцитата, на дан 09.07.2023, **Прилог 22**), док према истој бази вредност *Hirsch*-овог индекса (*h*-индекс) износи 23 (без аутоцитата).

Параметри квалитета часописа и позитивна цитираност кандидатових радова

Након избора у претходно звање, Др Дејан Миленковић је објавио радове у следећим часописима:

- *Chemical Engineering Journal* (**M21a**) IF_{2021} = 16.744, Engineering, Chemical;
- *Antioxidants* (**M21a**) IF_{2021} = 7.675, Chemistry, Medicinal;

- *Chemico-Biological Interactions* (**M21**) IF_{2022}=5.168, Pharmacology & Pharmacy;
- *International Journal of Molecular Sciences* (**M21**) IF_{2021} = 6.208, Chemistry, Multidisciplinary;
- *Reaction Chemistry & Engineering journal* (**M21**) IF_{2021} = 5.200, Engineering, Chemical;
- *Toxics* (**M21**) IF_{2022} = 4.600, Toxicology;
- *Computer Methods and Programs in Biomedicine* (**M21**) IF_{2022} = 7.027, Engineering, Biomedical;
- *Journal of Ethnopharmacology* (**M21**) IF_{2021} = 5.195, Chemistry, Medicinал;
- *Phytochemistry* (**M21**) IF_{2020} = 4.072, Plant Sciences;
- *The Journal of Chemical Thermodynamics* (**M22**) IF_{2021} = 3.269, Chemistry, Physical;
- *Applied Sciences* (**M22**) IF_{2022} = 3.269, Chemistry, Multidisciplinary;
- *New Journal of Chemistry* (**M22**) IF_{2021}= 3.925, Chemistry, Multidisciplinary;
- *Journal of Molecular Structure* (**M22**) IF_{2021}=3.841, Chemistry, Physical;
- *Computational Biology* and *Chemistry* (**M22**) IF_{2020} = 2.877, Computer Science, Interdisciplinary Applications;
- *RSC Advances* (**M22**) IF_{2020}=3.361, Chemistry, Multidisciplinary;
- *Journal of Molecular Structure* (**M22**) IF_{2020}=3.196, Chemistry, Physical;
- *Journal of Molecular Structure* (**M22**) IF_{2019}=2.463, Chemistry, Physical;
- *ChemistrySelect* (**M23**) IF_{2018}=1.811, Chemistry, Multidisciplinary;
- Journal of the Serbian Chemical Society (**M23**) IF_{2019}=1.097, Chemistry, Multidisciplinary.

Сви наведени радови су високо рангирани, са листе **M21a** (4 рада), **M21** (9 радова), **M22** (10 радова), **M23** (2 рада) и **M24** (2 рада). Укупна цитираност радова од претходног избора до јула 2023. године износи 309, без аутоцитата.

Најцитиранија су следеће публикације:

- **M21a-2.3** = 43 хетероцитатата, **M21a-2.2** = 13 хетероцитатата, **M21a-2.4** = 5 хетероцитатата, **M21a-2.1** = 4 хетероцитатата; **65 хетероцитатата**

- **M21-2.13** = 34 хетероцитата, **M21-2.11** = 24 хетероцитата, **M21-2.6** = 10 хетероцитата, **M21-2.10** = 4 хетероцитата, **M21-2.12** = 3 хетероцитата, **M21-2.8** = 2 хетероцитата; **77 хетероцитата**
- **M22-2.19** = 33 хетероцитата, **M22-2.20**= 30 хетероцитата, **M22-2.17** = 28 хетероцитата, **M22-2.18** = 26 хетероцитата, **M22-2.22** = 23 хетероцитата, **M22-2.16** = 10 хетероцитата, **M22-2.21** = 8 хетероцитата, **M22-2.15** = 3 хетероцитата, **M22-2.23** = 3 хетероцитата; **166 хетероцитата**
- **M24-2.26** = 2 хетероцитата, **2 хетероцитата**

Ефективни број радова и број радова нормиран на основу броја коаутора

Након избора у звање виши научни сарадник, др Дејан Миленковић је публиковао укупно **25** научних радова на SCI листи. Узимајући у обзир да се научна област др Дејана Миленковића може најпре дефинисати као мултидисциплинарни вид истраживања за који је неопходно укључити различите научне дисциплине, постоји одређен број научних радова који имају више од 7 (за коаутора и сходно *Правилнику о стицању истраживачких и научних звања*, подлежу нормирању броја бодова дефинисаних за сваку категорију научних резултата. Према *Правилнику (*Прилог 1 и одредба 1.4) радови **M21-2.6**, **M21-2.10**, **M21-2.11, M22-2.18** и **M22-2.20** подлежу нормирању броја бодова по формули К/(1+0,2(n-7)), n>7 (то су експериментално-теоријски радови са више од 7 аутора), док остали радови не подлежу нормирању. Такође, радови **M21a-2.4, M21-2.8, M22-2.14, M22-2.16, M22-2.17,** и **M22-2.22** подлежу нормирању по формули К/(1+0,2(n-5)), n>5 (то су теоријски радови са применом нумеричких симулација са више од 5 аутора).

Степен самосталности и степен учешћа у реализацији радова у научним центрима у земљи и иностранству

Др Дејан Миленковић је остварио висок степен самосталности у научно-истраживачком раду, који се огледа у осмишљавању истраживања, креирању, планирању и реализацији спроведених истраживања, анализи резултата, писању и публиковању радова, као и писању пројеката.

Учествује је у извођењу квантно-хемијских прорачуна применом теорије функционала густине (Density Functional Theory - DFT), предвиђању протеин-лиганд интеракција применом молекулског докинга и молекулске динамике, као испитивању квантитативног односа структуре и активности одабраних једињења. Такође је учествовао у анализи и обради добијених резултата, као и писању самих радова, на основу којих су објављени експериментално-теоријски и теоријски радови (примена нумеричких симулација). Од укупно 59 објављених радова категорије **M20**, 31 рад је објављен до избора у звање виши научни сарадник, док је 28 објављен након избора. Треба напоменути да кандидат учествује или је учествовао на међународним пројектима при чему је остварио међународну сарадњу са истраживачима из иностранства. Такође, кандидат има објављене научне радове проистекли из те сарадње. Др Дејан Миленковић се тренутно налази у САД као гостујући научник и из те сарадње има заједнички рад.

Допринос кандидата реализацији коауторских радова

Кандидат др Дејан Миленковић је од 28 радова категорије M20 објављених након избора у научно звање виши научни сарадник, први аутор на 5 радова и аутор задужен за коресподенцију (**M21a-2.3, M22-2.14, M22-2.19, M22-2.20** и **M24-2.28**), док је задњи аутор на једном раду**, M21-2.7**. У њима је аутор дао највећи допринос у извођењу прорачуна, анализи и обради добијених резултата, као и у писању самих радова.

Значај радова

Сви радови кандидата објављени након претходног избора недвосмислено указују на велики значај, јер су објављени у водећим међународним часописима. Наиме, кандидат др Дејан Миленковић је објавио као коаутор 4 рада у категорији **M21a**, од којих три рада су експериментално-теоријски (**M21a-2.1**, **M21a-2.2** и **M21a-2.3**) док рад **M21a-2.4** је теоријски. У категорији **M21** је објавио 9 радова од којих су 6 експериментално-теоријски. Са друге стране, десет радова је објавио у категорији **M22,** од којих су **M22-2.15, M22-2.18, M22-2.20, M22-2.21, M22-2.22 и M22-2.23** експериментално-теоријског карактера. Радови **M23-2.24 и M23-2.25** објављени у категорији **M23** су експериментално-теоријски. Изложено недвосмислено указује да

је др Дејан Миленковић остварио висок ниво квалитета у научним истраживањима у Физичкој органској хемији, као и у расветљавању антиоксидативних механизама различитих природних једињења и тиме је остварио значајан утицај на развој у области Физичке органске хемије. Значај радова се огледа и кроз укупан збир импакт фактора (ИФ) свих радова до сада публикованих чији је збир износи 219.09, док просечан ИФ по раду износи 3.91. Од избора у претходно звање просечан ИФ се увећао на 5.62 по раду. У прилог томе иде да су сви радови Др Дејана Миленковића цитирани 1232 пута по евиденцији базе Scopus вредност (без аутоцитата, на дан 09.07.2023), док према истој бази вредност *h*-индекс износи 23.

5. Испуњеност услова за стицање предложеног научног звања на основу коефицијената М

Научни резултати др Дејана Миленковића и његова компетентност за избор у звање **научни саветник** се могу квантитативно окарактерисати следећим вредностима М фактора:

Ознака фактора	Укупан број радова	Вредност индикатора	Укупна вредност (нормирано)
M_{13}	**2**	**7**	**14**
M_{21a}	**4**	**10**	**40 (36.25)**
M_{21}	**9**	**8**	**72 (59.55)**
M_{22}	**10**	**5**	**50 (43.82)**
M_{23}	**2**	**3**	**6**
M_{24}	**3**	**2**	**6**
M_{33}	**14**	**1**	**14**
M_{34}	**7**	**0.5**	**3.5**
M_{63}	**2**	**1**	**2**
M_{64}	**4**	**0.2**	**0.8**
Укупна вредност коефицијента М			**208,3 (185.9)**

Од тога до стицања претходног научног звања **виши научни сарадник**:

Ознака фактора	Укупан број радова	Вредност индикатора	Укупна вредност (нормирано)
M_{21a}	**4**	**10**	**40 (38.33)**

M_{21}	**4**	**8**	**32 (29.00)**
M_{22}	**7**	**5**	**35 (32.20)**
M_{23}	**6**	**3**	**18 (14.71)**
M_{33}	**8**	**1**	**8**
M_{34}	**7**	**0.5**	**3.5**
M_{52}	**1**	**1.5**	**1.5**
M_{53}	**1**	**1**	**1**
M_{63}	**2**	**1**	**2**
M_{64}	**4**	**0.2**	**0.8**
Укупна вредност коефицијента М			**141.8 (131.4)**

МИНИМАЛНИ КВАНТИТАТИВНИ ЗАХТЕВИ ЗА СТИЦАЊЕ ПОЈЕДИНАЧНИХ НАУЧНИХ ЗВАЊА

За природно-математичке и медицинске науке

Диференцијални услов – од првог избора у звање виши научни сарадник до избора у звање научни саветник	Потребно је да кандидат има најмање 105 поена, који треба да припадају следећим категоријама:		
		Неопходно	Остварено
Научни саветник	Укупно	70 **(+ 50%) = 105**	185.9
Обавезни (1)	M10+M20+M31+M32+M33+M41+M42+M90	50 **(+ 50%) = 75**	179.6
Обавезни (2)	M11+M12+M21+M22+M23	35 **(+ 50%) =52.5**	139.6

ЗАКЉУЧАК КОМИСИЈЕ

На основу релевантних података Комисија закључује да је кандидат др Дејан Миленковић, виши научни сарадник запослен у Институту за информационе технологије Крагујевац, остварио запажене резултате у научно-истраживачком и стручном раду, што је верификовао објављивањем 56 научних радова као први аутор, аутор за кореспоненцију и коаутор. Сви радови су објављени у часописима на SCI листи. Објавио је преко 60 рада на домаћим и међународним скуповима. Држао је усмена излагања на научним скуповима од међународног и националног значаја. Након избора у научно звање виши научни сарадник, Др Дејан Миленковић је

објавио 28 научна рада категорије **M20** (**M21a**=4, **M21**=9, **M22**=10, **M23**=2 и **M24**=3). Укупан збир импакт фактора (**Σ**$IF_{укупно}$) свих радова до сада публикованих је **Σ**$IF_{укупно}$ = 219.09, што подељено са бројем радова **56** (категорије **M21a, M21, M22, M23**) износи просечно 3.91 по раду. Од избора у претходно звање збир импакт фактора је **Σ**$IF_{укупно}$ = 140.4, што подељено са бројем радова **25** (категорије **M21a, M21, M22, M23**) износи просечно 5.62 по раду. У периоду од 2011.-2023. године, сви радови Др Дејана Миленковића су цитирани 1232 пута по евиденцији базе Scopus вредност (без аутоцитата, на дан 09.07.2023, **Прилог 22**), док према истој бази вредност *Hirsch*-овог индекса (*h*-индекс) износи 23 (без аутоцитата). Укупна цитираност радова од претходног избора до јула 2023. године износи 309, без аутоцитата. У периоду од значаја за избор у звање научни саветник, кандидат први аутор на 5 рада и аутор задужен за коорсеподенцију (**M21a-2.3, M22-2.14, M22-2.19, M22-2.20** и **M24-2.28**), док је задњи аутор на једном раду**, M21-2.7**. Висок степен самосталности кандидата у научно-истраживачком раду се огледа и у успешном вођењу пројектних задатака у оквиру једног националног пројеката број VI-03-232 и у оквиру једног билатералног пројекта број 337-00-110/2023-05/20. Треба напоменути да кандидат учествује или је учествовао на 4 међународна пројекта. Кандидат тренутно борави на Државном Универзитету, Северна Дакоти у Фаргу (North Dakota State University-NDSU) као гостујући научник (J-1 Visiting Scientist). Током свог боравка учествоваће на пар пројеката који су повезани са моделирањем процеса деградације полимерних материјала, као и испитивањем токсичности органских једињења и развојем метода за предвиђање особина полимерних материјала. Др Дејан Миленковић има дугогодишњу сарадњу са Универзитетом Јосип Јурај Штросмајер у Осјеку, Хрватска. Од 2021. године је успоставио међународну сарадњу са проф. др Гораном Калуђеровићем са Универзитета примењених наука Мерзебургу (University of Applied Sciences Merseburg) у Немачкој. Поред научног доприноса и учешћа у организационим одборима међународних конференција, као председник локалног извршног одбора и као члан, кандидат је активно и непосредно учествовао у раду са студентима докторских студија. Кандидат је коментор за оцену и одбрану докторске дисертације на Природно-математичком факултету, Универзитета у Крагујевцу. Такође је био члан

за оцену и одбрану докторске дисертације на Природно-математичком факултету, Универзитета у Крагујевцу.

Изложено недвосмислено указује да је др Дејан Миленковић остварио висок ниво квалитета и самосталности у научним истраживањима у области природно-математичких наука, у области Физичке органске хемије, као и у расветљавању антиоксидативних механизама различитих природних једињења и тиме је остварио значајан утицај на развој науке у земљи и иностранству. На основу свих остварених квантитативних и квалитативних критеријума, кандидат је и формално стекао право на избор у звање научни саветник.

Комисија је на основу детаљног увида у научно-истраживачки и стручни рад **др Дејана Миленковића** закључила да је кандидат испунио све законом прописане услове да буде изабран у научно звање **научни саветник**.

У Београду, Крагујевцу

Комисија:

1. Проф. др Зоран Марковић, научни саветник, Институт за информационе технологије Крагујевац, **председник Комисије**

2. Др Жељко Чупић, научни саветник, ИХТМ-Центар за катализу и хемијско инжењерство, **члан Комисије**

3. Др Бојана Остојић, научни саветник, ИХТМ-Центар изузетних вредности за хемију и инжењеринг животне средине, **члан Комисије**