Универзитет у Београду
Институт за хемију, технологију и металургију
Институт од националног значаја за Републику Србију
Његошева 12, 11000 Београд

НАУЧНОМ ВЕЋУ

ИНСТИТУТА ЗА ХЕМИЈУ, ТЕХНОЛОГИЈУ И МЕТАЛУРГИЈУ

Одлуком Научног већа Универзитета у Београду - Института за хемију, технологију и металургију - Института од националног значаја за Републику Србију, (број: 422/05.05.2023) донетој на 51.електронској седници одржаној 05.05.2023, одређени смо за чланове Комисије за писање Извештаја за избор у научно звање **Виши научни сарадник,** др Марка Поповића, вишег стручног сарадника Института за хемију, технологију и металургију, Центра за електрохемију. На основу прегледа достављене документације о научно–истраживачком раду кандидата, у складу са *Законом о науци и истраживању* („Службени гласник РС“, бр. 49/2019) и *Правилником о стицању истраживачких и научних звања* („Службени гласник РС“, бр.159/2020 и бр. 14/2023) подносимо Научном већу Института за хемију, технологију и металургију следећи:

ИЗВЕШТАЈ

I. БИОГРАФСКИ ПОДАЦИ

Марко Поповић рођен је 02.06.1990. у Београду. Основну школу и гимназију завршио је у Београду. Основне академске студије завршио је 2013. године на Хемијском Факултету Универзитета у Београду, на смеру дипломирани хемичар. Мастер студије завршио је 2014. године на Факултету за Физичку хемију Универзитета у Београду, на смеру мастер физикохемичар. Докторске студије завршио је у августу 2018. године на *Department of Chemistry and Biochemistry, Brigham Young University* у Сједињеним Америчким Државама (САД). Одбранио је докторску дисертацију *Application of the Entropy Concept to Thermodynamics and Life Sciences* (ментори *Brian F. Woodfield*, *Lee D. Hansen, H. Dennis Tolley*), а уверење о нострификацији докторске дипломе од стране Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије добио је 27.06.2019.

У периоду од јуна 2019 до децембра 2022, радио је као истраживач на *School of Life Sciences, Technical University of Munich* у Немачкој. У периоду од маја 2021 до априла 2022, радио је као предавач на *EuroTeQ Engineering University*.

Од 1. априла 2022. ради као виши стручни сарадник на Институту за хемију, технологију и металургију.

Кандидат, др Марко Поповић, се бавити научно-истраживачким радом области: а) хемијска карактеризација субцелуларних и целуларних микроорганизама, као и мултицелуларних организама. б) истраживање хемијских и термодинамичких особина интеракција микроорганизама са окружењем. в) термодинамичка карактеризација органских и неорганских материјала. г) хемијска и термодинамичка карактеризација хидролизе целулозе од стране микроорганизама. Кандидат се бави теоријском хемијом,

тачније хемијском термодинамиком, биотермодинамиком и биоенергетиком истраживањем у области биотермодинамике и биоенергетике, које представљају иновативне мултидисциплинарне области, на пресеку хемије, биологије, физике и инжењерства. Ова област истраживања има велики потенцијал у решавању најактуелнијих проблемима човечанства, као што су разумевање интеракција између паразита и домаћина, одржива економија и заштита животне средине. Кандидат се бавио хемијском и термодинамичком карактеризацијом живе материје. Тема истраживања кандидата су биотермодинамичка и биоенергетска карактеризација живе материје и биолошких процеса у којима се врши карактеризација живих организама и биомасе микроорганизама (бактерија, алги, гљива и вируса), са применама у дизајну биопроцеса за одрживу производњу. Такође, кандидат се бави утицајем енергије на интеракције међу организмима, укључујући вирус-домаћин, бактерија-домаћин и гљива-домаћин интеракције, као и интеракцијама организама у животној средини. Први је објавио емпиријску формулу и стандардне термодинамичке особине *SARS-CoV-2*, *SARS*, *MERS*, *Ebola*, *MPXV*, *Herpes simplex type 1*, *HIV-1*, бактериофага и других вируса, као и вироида. Такође је први хемијски и термодинамички окарактерисао преко 35 врста бактерија, алги и гљива.

Др Марко Поповић је учествовао у међународној сарадњи са истакнутим истраживачима широм света, укључујући *prof Dr Urs von Stockar* (*École Polytechnique Fédérale de Lausanne*, Швајцарска), *prof Dr Nieves Barros* (*University of Santiago de Compostela*, Шпанија), *prof Dr Richard Head* (*University of South Australia*, Аустралија), *prof Dr Jennifer Martin* (*University of Newcastle*, Аустралија), *Dr Gavin Stenning* (*Rutherford Appleton Laboratory*, Уједињено Краљевство), *prof Dr Alexandra Navrotsky* (*University of California – Davies*, САД) и *prof Dr Marek Pyda* (*Rzeszów University of Technology*, Пољска) и *prof Dr Christophe Coquelet* (*École nationale supérieure des mines de Paris*, Француска).

Током рада, кандидат је био награђиван домаћим и међународним наградама и признањима:

- 2023 *Highly Cited Papers of Microorganisms* додељена од *MDPI*
- 2022 *Elsevier certificate for publishing 3 open access articles with 1 linked to UN Sustainable Development Goal 3: "Ensure healthy lives and promote well-being for all at all ages"*
- 2014 *The High Impact Doctoral Research Assistantship - HIDRA* - додељена од *BYU*
- 2013 Награда за изузетан успех током студија хемије, додељена од Српског Хемијског Друштва
- 2012 Награда за најбољи студентски научно-истраживачки рад Београдског Универзитета
- 2011 *The William F. Giauque Memorial Award*
- 2010 *Travel grant for 21st ICCT 2010, Tsukuba, Japan*

Др Марко Поповић је члан *Associate Editorial Board* часописа *Frontiers in Plant Science*, који је од стране Министарства науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије рангиран као међународни часопис изузетних вредности (M21a). Такође је и члан *International Society for Biological Calorimetry (ISBC)*.

Кандидат је радио као рецензент у међународним научним часописима: *The Lancet Regional Health - Southeast Asia (Elsevier); Scientific Reports (Nature Research); Energy storage (Wiley); Microbial Risk Analysis (Elsevier) Applied sciences (MDPI); Physica A (Elsevier); Talanta (Elsevier); Acta Biotheoretica (Springer); Journal of Theoretical Biology (Elsevier); Journal of Biosafety and Biosecurity (Elsevier); Systems Research and Behavioral Science (Wiley); Ageing Research Reviews (Elsevier); Proceedings A (Royal Society); Journal of the Serbian Chemical Society.*

Др Марко Поповић аутор је 39 библиографске јединице (први аутор на 31 публикација и аутор одговоран за коресподенцију на 30 публикација), од којих (према Правилнику о стицању истраживачких и научних звања, "Службени гласник РС", број 159 од 30. децембра 2020.): 1 рад у међународном часопису изузетне вредности М21а, 9 радова у врхунским међународним часописима М21, 15 радова у истакнутим међународним часописима М22, 7 радова у међународним часописима М23, 1 саопштење са међународног скупа штампано у целини М33, 2 саопштења са међународних скупова штампана у изводу М34 и 2 рада у националним часописима М53. Два рада нису категорисана. Публиковани радови су до сада цитирани 408 пута и *h-index* је 13 према *Scopus* бази података (на дан 10.05.2023), односно 143 цитата и *h-index* 7 без аутоцитата (на дан 10.05.2023).

Кандидат је такође био ангажован у извођењу наставе, у Европи (Немачка, Холандија, Чешка, Естонија) и Сједињеним Америчким Државама. Током школске године 2021/22, у сарадњи са проф др *Urs von Stockar*, развио је и одржао један од првих курсева на тему биотермодинамике у Европи. Курс је победио на конкурсу 2021 *EuroTeQ Teaching Fund* и био финансиран од стране Европске комисије и Немачке службе за академску размену. Предаван је у 4 европске земље на *EuroTeQ Engineering University*. Такође, кандидат је учествовао у организацији и настави курса на тему фармацеутске технологије на *Technical University of Munich*, Немачка. Кандидат је учествовао и у настави 8 предмета као асистент, на *Brigham Young University*, САД. Кандидат се користи Енглеским језиком (ниво С2).

II. БИБЛИОГРАФИЈА

За избор у звање Виши научни сарадник узети су у обзир радови др Марка Поповића који су публиковани у последњих десет година, а до 28.04.2023. када је кандидат предао захтев Научном већу Института за хемију, технологију и металургију за избор у звање Виши научни сарадник.

Др Марко Поповић, виши стручни сарадник

ORCID број: https://orcid.org/0000-0003-0934-5550

ИХТМ репозиторијум:
https://cer.ihtm.bg.ac.rs/discover?scope=%2F&query=%22Popovi%C4%87,%20Marko%22&submit=

Google Scholar: https://scholar.google.com/citations?user=5NK21icAAAAJ&hl=en

Research Gate: https://www.researchgate.net/profile/Marko-Popovic-2

Scopus ID: 35099192300

Датум: 28.04.2023.

Укупно библиографских јединица: 39
Први аутор: 31
Кореспондентни аутор: 30

* - Кореспондентни аутор

1. **М20 Радови објављени у у међународним часописма; научна критика, уређивање часописа**

М20 = 175.34 ИФ = 105.18

М21а Радови у међународном часопису изузетних вредности (М21а = 10; 1×10 = 10)

1.1. **Popovic, M.*** & Minceva, M. (2021). Standard thermodynamic properties, biosynthesis rates and the driving force of growth of 5 agricultural plants. *Frontiers in Plant Science*, *12*, 871. https://doi.org/10.3389/fpls.2021.671868
ИФ5: 7.255 (2021)
Област и ранг: Plant Sciences, 19/240
Цитираност (без аутоцитата): 2
Број аутора: 2

М21 Радови у врхунском међународном часопису (М21 = 8; 7×8 + 2×6.67 = 69.34)

1.2. **Popovic, M.*** (2023). XBB.1.5 Kraken cracked: Gibbs energies of binding and biosynthesis of the XBB.1.5 variant of SARS-CoV-2. *Microbiological Research*, 127337. https://doi.org/10.1016/j.micres.2023.127337
ИФ5: 7.103 (2021)
Област и ранг: Microbiology, 28/138
Цитираност (без аутоцитата): 0
Број аутора: 1

1.3. **Popovic, M.*** (2022). Biothermodynamics of Viruses from Absolute Zero (1950) To – Virothermodynamics (2022). *Vaccines*, 10(12), 2112. https://doi.org/10.3390/vaccines10122112
ИФ5: 5.513 (2020)
Област и ранг: Medicine, Research & Experimental, 37/140
Цитираност (без аутоцитата): 0

Број аутора: 1

1.4. **Popovic, M.*** & Minceva, M. (2021). Coinfection and Interference Phenomena Are the Results of Multiple Thermodynamic Competitive Interactions. *Microorganisms*, *9(10)*, 2060. https://doi.org/10.3390/microorganisms9102060
ИФ: 4.152 (2019)
Област и ранг: Microbiology, 37/135
Цитираност (без аутоцитата): 5
Број аутора: 2

1.5. Neilsen, G., Rosen, P. F., Dickson, M. S., **Popovic, M.**, Schliesser, J., Hansen, L. D., Navrotsky, A., & Woodfield, B. F.* (2021). Heat capacities and thermodynamic functions of neodymia and samaria doped ceria. *The Journal of Chemical Thermodynamics*, 158, 106454. https://doi.org/10.1016/j.jct.2021.106454
ИФ: 2.888 (2019)
Област и ранг: Thermodynamics, 14/61
Цитираност (без аутоцитата): 0
Број аутора: 8 (нормирано M=6.67)

1.6. Neilsen, G., Rosen, P.F., Dickson, M.S., **Popovic, M.**, Schliesser, J., Hansen, L.D. Navrotsky, A. and Woodfield, B.W.* (2020). Quantifying oxygen vacancies in neodymium and samarium doped ceria from heat capacity measurements. *Acta Materialia*, 188, 740-744. https://doi.org/10.1016/j.actamat.2020.02.055
ИФ5: 9.277 (2020)
Област и ранг: Materials Science, Multidisciplinary, 45/334
Цитираност (без аутоцитата): 6
Број аутора: 8 (нормирано M=6.67)

1.7. **Popovic, M.**, Woodfield, B.F. and Hansen, L.D.* (2019). Thermodynamics of Hydrolysis of Cellulose to Glucose from 0 to 100°C: Cellulosic Biofuel Applications and Climate Change Implications. *Journal of Chemical Thermodynamics*, 128, 244-250. https://doi.org/10.1016/j.jct.2018.08.006
ИФ: 2.888 (2019)
Област и ранг: Thermodynamics, 14/61
Цитираност (без аутоцитата): 8
Број аутора: 3

1.8. Hansen, L.D., **Popovic, M.**, Tolley, H.D. and Woodfield, B.F.* (2018). Laws of evolution parallel the laws of thermodynamics. *Journal of Chemical Thermodynamics*, 124, 141-148. https://doi.org/10.1016/j.jct.2018.05.005
ИФ5: 2.784 (2016)
Област и ранг: Thermodynamics, 12/58
Цитираност (без аутоцитата): 8

Број аутора: 4

1.9. Czerniecka-Kubicka, A., Zarzyka, I., Walczak, M., Schliesser, J., **Popovic, M.**, Woodfield, B.F. and Pyda, M.* (2017). Molecular interpretation of low-temperature heat capacity of aliphatic oligo-urethane. *The Journal of Chemical Thermodynamics*, 112, 299-307. https://doi.org/10.1016/j.jct.2017.05.019
ИФ5: 2.784 (2016)
Област и ранг: Thermodynamics, 12/58
Цитираност (без аутоцитата): 8
Број аутора: 7

1.10. Coquelet, C.*, Valtz, A., Stringari, P., **Popovic, M**., Richon, D. and Mougin, P.* (2014). Phase equilibrium data for the hydrogen sulphide + methane system at temperatures from 186 to 313 K and pressures up to about 14 MPa. *Fluid Phase Equilibria*, 383, 94-99. https://doi.org/10.1016/j.fluid.2014.09.025
ИФ: 2.379 (2012)
Област и ранг: Thermodynamics, 6/55
Цитираност (без аутоцитата): 17
Број аутора: 6

M22 Радови у истакнутом међународном часопису (M22 = 5; 15×5 = 75)

1.11. **Popovic, M.*** (2022). Why doesn't Ebola virus cause pandemics like SARS-CoV-2? *Microbial Risk Analysis*, 22, 100236. https://doi.org/10.1016/j.mran.2022.100236
ИФ5: 2.534 (2020)
Област и ранг: Food Science & Technology, 84/144
Цитираност (без аутоцитата): 0
Број аутора: 1

1.12. **Popovic M.*** (2022). Beyond COVID-19: Do biothermodynamic properties allow predicting the future evolution of SARS-CoV-2 variants? *Microbial Risk Analysis*, 22, 100232. https://doi.org/10.1016/j.mran.2022.100232
ИФ5: 2.534 (2020)
Област и ранг: Food Science & Technology, 84/144
Цитираност (без аутоцитата): 0
Број аутора: 1

1.13. **Popovic, M.*** (2022). Strain Wars 4 - Darwinian evolution through Gibbs' glasses: Gibbs energies of binding and growth explain evolution of SARS-CoV-2 from Hu-1 to BA.2. *Virology*, 575, 36-42. https://doi.org/10.1016/j.virol.2022.08.009
ИФ: 3.967 (2020)
Област и ранг: Virology, 15/37

Цитираност (без аутоцитата): 0
Број аутора: 1

1.14. **Popovic, M.*** (2022). Strain Wars 5: Gibbs energies of binding of BA.1 through BA.4 variants of SARS-CoV-2. *Microbial Risk Analysis*, 22, 100231. https://doi.org/10.1016/j.mran.2022.100231
ИФ5: 2.534 (2020)
Област и ранг: Food Science & Technology, 84/144
Цитираност (без аутоцитата): 0
Број аутора: 1

1.15. **Popovic, M.*** (2022). Strain wars 3: Differences in infectivity and pathogenicity between Delta and Omicron strains of SARS-CoV-2 can be explained by thermodynamic and kinetic parameters of binding and growth. *Microbial Risk Analysis*, 22, 100217. https://doi.org/10.1016/j.mran.2022.100217
ИФ5: 2.534 (2020)
Област и ранг: Food Science & Technology, 84/144
Цитираност (без аутоцитата): 2
Број аутора: 1

1.16. **Popovic, M.*** (2022). Strain wars 2: Binding constants, enthalpies, entropies, Gibbs energies and rates of binding of SARS-CoV-2 variants. *Virology*, 570, 35-44. https://doi.org/10.1016/j.virol.2022.03.008
ИФ5: 3.967 (2020)
Област и ранг: Virology, 15/37
Цитираност (без аутоцитата): 0
Број аутора: 1

1.17. **Popovic, M.*** and Popovic, M. (2022). Strain Wars: Competitive interactions between SARS-CoV-2 strains are explained by Gibbs energy of antigen-receptor binding. *Microbial Risk Analysis*, 21, 100202. https://doi.org/10.1016/j.mran.2022.100202
ИФ5: 2.534 (2020)
Област и ранг: Food Science & Technology, 84/144
Цитираност (без аутоцитата): 0
Број аутора: 1

1.18. **Popovic, M.*** (2022). Atom counting method for determining elemental composition of viruses and its applications in biothermodynamics and environmental science. *Computational Biology and Chemistry*, *96*, 107621. https://doi.org/10.1016/j.compbiolchem.2022.107621
ИФ: 3.737 (2021)
Област и ранг: Biology, 32/94
Цитираност (без аутоцитата): 0

Број аутора: 1

1.19. **Popovic, M.*** Stenning, G. B., Göttlein, A., & Minceva, M. (2021). Elemental composition, heat capacity from 2 to 300 K and derived thermodynamic functions of 5 microorganism species. *Journal of Biotechnology*, *331*, 99-107. https://doi.org/10.1016/j.jbiotec.2021.03.006
ИФ5: 4.122 (2021)
Област и ранг: Biotechnology & Applied Microbiology, 64/161
Цитираност (без аутоцитата): 0
Број аутора: 4

1.20. **Popovic, M.*** and Minceva, M. (2020). Thermodynamic insight into viral infections 2: empirical formulas, molecular compositions and thermodynamic properties of SARS, MERS and SARS-CoV-2 (COVID-19) viruses. *Heliyon*, *6*(9), e04943. https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2020.e04943
ИФ: 3.776 (2021)
Област и ранг: Multidisciplinary Sciences, 28/74
Цитираност (без аутоцитата): 16
Број аутора: 2

1.21. **Popovic, M.*** and Minceva, M. (2020). A thermodynamic insight into viral infections: do viruses in a lytic cycle hijack cell metabolism due to their low Gibbs energy? *Heliyon*, 6(5), e03933. https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2020.e03933
ИФ: 3.776 (2021)
Област и ранг: Multidisciplinary Sciences, 28/74
Цитираност (без аутоцитата): 11
Број аутора: 2

1.22. **Popovic, M.*** and Minceva, M. (2020). Thermodynamic properties of human tissues. *Thermal Science*, 24(6B), 4115-4133. https://doi.org/10.2298/TSCI200109151P
ИФ: 1.541 (2018)
Област и ранг: Thermodynamics, 35/60
Цитираност (без аутоцитата): 9
Број аутора: 2

1.23. **Popovic, M.*** (2019). Thermodynamic properties of microorganisms: determination and analysis of enthalpy, entropy, and Gibbs free energy of biomass, cells and colonies of 32 microorganism species. *Helyon*, 5(6), e01950. https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2019.e01950
ИФ: 3.776 (2021)
Област и ранг: Multidisciplinary Sciences, 28/74
Цитираност (без аутоцитата): 36
Број аутора: 1

1.24. **Popovic, M.*** (2014). Comparative study of entropy and information change in closed and open thermodynamic systems. *Thermochimica Acta*, 598, 77-81.
https://doi.org/10.1016/j.tca.2014.11.002
ИФ5: 2.392 (2014)
Област и ранг: Chemistry, Physical, 65/139
Цитираност (без аутоцитата): 4
Број аутора: 1

1.25. **Popovic, M.*** (2014). Entropy change of open thermodynamic systems in self-organizing processes. *Thermal Science*, 18(4), 1425-1432.
https://doi.org/10.2298/TSCI140424065P
ИФ: 1.222 (2014)
Област и ранг: Thermodynamics, 25/55
Цитираност (без аутоцитата): 8
Број аутора: 1

M23 Радови у међународном часопису (M23 = 3; 10×3 = 30)

1.26. **Popovic, M.*** (2023). *SARS-CoV-2 strain wars continues: Chemical and thermodynamic characterization of live matter and biosynthesis of Omicron BN.1, CH.1.1 and XBC variants. Microbial Risk Analysis, 24, 100260.*
https://doi.org/10.1016/j.mran.2023.100260
ИФ5: 2.120 (2021)
Област и ранг: Food Science & Technology, 109/144
Цитираност (без аутоцитата): 0
Број аутора: 1

1.27. **Popovic, M.*** (2023). Never ending story? Evolution of SARS-CoV-2 monitored through Gibbs energies of biosynthesis and antigen-receptor binding of Omicron BQ.1, BQ.1.1, XBB and XBB.1 variants. *Microbial Risk Analysis*, 100250.
https://doi.org/10.1016/j.mran.2023.100250
ИФ5: 2.120 (2021)
Област и ранг: Food Science & Technology, 109/144
Цитираност (без аутоцитата): 0
Број аутора: 1

1.28. **Popovic, M.*** (2023). The SARS-CoV-2 Hydra, a monster from the 21st century: Thermodynamics of the BA.5.2 and BF.7 variants. *Microbial Risk Analysis*, 100249.
https://doi.org/10.1016/j.mran.2023.100249
ИФ5: 2.120 (2021)
Област и ранг: Food Science & Technology, 109/144
Цитираност (без аутоцитата): 0

Број аутора: 1

1.29. **Popovic, M.*** (2023). Thermodynamics of Bacteria-Phage Interactions: T4 and Lambda Bacteriophages, and E. Coli Can Coexist in Natural Ecosystems due to the Ratio of their Gibbs Energies of Biosynthesis. *Thermal Science*, 27(1), 411-431.
https://doi.org/10.2298/TSCI2301411P
ИФ: 1.971 (2021)
Област и ранг: Thermodynamics, 44/63
Цитираност (без аутоцитата): 0
Број аутора: 1

1.30. **Popovic, M.*** (2022). Formulas for death and life: Chemical composition and biothermodynamic properties of Monkeypox (MPV, MPXV, HMPXV) and Vaccinia (VACV) viruses. *Thermal Science*, 26(6A), 4855-4868.
https://doi.org/10.2298/TSCI220524142P
ИФ: 1.971 (2021)
Област и ранг: Thermodynamics, 44/63
Цитираност (без аутоцитата): 0
Број аутора: 1

1.31. **Popovic M.*** & Minceva, M. (2021). Comment on: "A critical review on heat and mass transfer modelling of viral infection and virion evolution: The case of SARS-CoV2". *Thermal Science*. http://dx.doi.org/10.2298/TSCI211021329P
ИФ: 1.971 (2021)
Област и ранг: Thermodynamics, 44/63
Цитираност (без аутоцитата): 0
Број аутора: 2

1.32. **Popovic, M.*** (2017). Living organisms from Prigogine's perspective: an opportunity to introduce students to biological entropy balance. *Journal of Biological Education*, 52(3), 294-300. https://doi.org/10.1080/00219266.2017.1357649
ИФ: 0.946 (2016)
Област и ранг: Education, Scientific Disciplines, 28/41
Цитираност (без аутоцитата): 4
Број аутора: 1

2. М30 Зборници међународних научних скупова

Укупно: М30 = 2

М33 Саопштење са међународног скупа штампано у целини (М33 = 1; 1×1=1)

2.1. **Popovic, M.*** (2015). Are Shannon entropy and Residual entropy synonyms? In *Proceedings of the 2nd Int. Electron. Conf. Entropy Appl.*, 15–30 November 2015;

Sciforum Electronic Conference Series, Vol. 2, 2015, A004; https://doi.org/10.3390/ecea-2-A004

M34 Саопштење са међународног скупа штампано у изводу (M34 = 0.5; 2×0.5 = 1)

2.2. Barros, N.*, Popovic, M., and Pérez-Cruzado, C. (2023). Complete thermodynamic characterization of the soil organic matter from forest ecosystems., EGU General Assembly 2023, Vienna, Austria, 24–28 Apr 2023, EGU23-1389, https://doi.org/10.5194/egusphere-egu23-1389

2.3. **Popovic, M.*** (2022). Differences in infectivity and pathogenicity between Delta and Omicron strains of SARS-CoV-2 can be explained by Gibbs energies of binding and growth. In: *Proceedings of the 21st Conferences of the International Society for Biological Calorimetry (ISBC 2022)*. Vilnius: UAB "Kalanis", p. 20. ISBN: 978-609-96039-2-6

3. M50 Радови у часописима националног значаја

Укупно: M50 = 2

M53 Рад у националном часопису (M53=1; 2×1 = 2)

3.1. **Popovic, M.*** (2023). Closer look into HIV-host interactions: Standard Gibbs energy of binding of the gp120 antigen of HIV-1 to the CD4 receptor and monoclonal antibodies. *Life in Silico*, 1(1), 8–12. Retrieved from https://life-insilico.com/index.php/pub/article/view/2

3.2. **Popovic, M.*** (2017). Explaining the entropy concept and entropy components. *Journal of Subject Didactics*, 2(2), 73-80. DOI: http://dx.doi.org/10.5281/zenodo.1239728

4. Остали радови у часописима који нису категорисани

4.1. **Popovic, M.*** (2022). Omicron BA.2.75 Sublineage (Centaurus) Follows the Expectations of the Evolution Theory: Less Negative Gibbs Energy of Biosynthesis Indicates Decreased Pathogenicity. *Microbiology Research*, 13(4), 937–952. MDPI AG. Retrieved from http://dx.doi.org/10.3390/microbiolres13040066
ИФ: Индексиран у *Scopus* (2-s2.0-85144680380; ISSN 2036-7473)
Област и ранг: /
Цитираност (без аутоцитата): 0
Број аутора: 1

4.2. **Popovic, M.*** (2022). Omicron BA.2.75 subvariant of SARS-CoV-2 is expected to have the greatest infectivity compared with the competing BA.2 and BA.5, due to most negative Gibbs energy of binding. *BioTech*, 11(4), 45.
https://doi.org/10.3390/biotech11040045
ИФ: Индексиран у *Scopus* (2-s2.0-85140880095; ISSN 2673-6284)
Област и ранг: /
Цитираност (без аутоцитата): 0
Број аутора: 1

Укупно: М = М13 + М14 + М21 + М22 + М23 + ... М92= 179.34
Укупан ИФ од избора: 105.18

III. ПЕТ НАЈЗНАЧАЈНИЈИХ НАУЧНИХ ОСТВАРЕЊА КАНДИДАТА

Из библиографије др Марка Поповића истичу се следећи радови:

1. **Popovic, M.*** (2019). Thermodynamic properties of microorganisms: determination and analysis of enthalpy, entropy, and Gibbs free energy of biomass, cells and colonies of 32 microorganism species. *Helyon*, 5(6), e01950.
https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2019.e01950

У овом раду по први пут су изведене хемијске формуле и термодинамичке особине за 32 врсте микроорганизама, који укључују бактерије, гљиве и алге. Хемијски састави микроорганизама приказани су у форми хемијских (емпиријских) формула. Термодинамичке особине укључују енталпију, ентропију и Гибсову енергију. Чланак се такође бави налажењем оптималне методе за одређивање енталпије живе материје и биомасе микроорганизама, уз помоћ експерименталних података из литературе, као и брзинама метаболизма микроорганизама. На основу нађених емпиријских формула и термодинамичких особина, урађена је термодинамичка анализа раста бактеријске колоније. Одређена је промена масе бактеријске колоније и њене ентропије током раста. Нађено је да паралелно са микробиолошким фазама раста микроорганизама, могу да се дефинишу и биоенергетске фазе раста. Овај рад је јако добро прихваћен у међународној научној јавности и цитиран је 36 пута, без аутоцитата према *Scopus* бази података.

2. **Popovic, M.*** (2022). Atom counting method for determining elemental composition of viruses and its applications in biothermodynamics and environmental science. *Computational Biology and Chemistry*, 96, 107621.
https://doi.org/10.1016/j.compbiolchem.2022.107621

У овом раду је описан *atom counting* метод за прорачун елементалног састава вируса на основу генетске секвенце, секвенци протеина и морфологије. *Atom counting* метод

се спроводи помоћу компјутерског програма који је за ову сврху развијен. Програм очитава генетске секвенце и секвенце протеина, који представљају биополимере, унутар којих сваки мономер (нуклеотид или аминокиселина) има прецизно дефинисан елементални састав. Програм сабира атоме свих елемената који долазе из различитих мономера да би нашао елементални састав биополимера. Затим множи атоме од сваког биополимера бројем копија тог биополимера у честици вируса и сабира бројеве атома сваког елемента у честици вируса. Након тога, уколико вирус има омотач, налази елементални састав омотача користећи податке о морфологији вируса. Овај метод примењен је на бројне вирусе, укључујући све важније варијанте *SARS-CoV-2* (*Hu-1, Delta B.1.617.2, Omicron BA.1, Omicron BA.2, Omicron BA.3, Omicron BA.4, Omicron BA.5, Omicron BA.2.75, Omicron BQ.1, Omicron BQ.1.1, Omicron XBB, Omicron XBB.1, Omicron XBB.1.5, Omicron BA.5.2, Omicron BF.7*), *SARS-CoV*, *MERS-CoV*, *Ebola virus*, *MPXV*, *Vaccinia virus*, бактериофагове и вироиде. *Atom counting* метод је добро прихваћен од стране научне јавности и употребљиван је од стране других истраживача:

Şimşek, B., Özilgen, M., & Utku, F. Ş. (2021). How much energy is stored in SARS-CoV-2 and its structural elements?. Energy Storage, e298. https://doi.org/10.1002/est2.298

Degueldre, C. (2021). Single virus inductively coupled plasma mass spectroscopy analysis: A comprehensive study. *Talanta*, *228*, 122211. https://doi.org/10.1016/j.talanta.2021.122211

3. **Popovic, M.*** (2023). Never ending story? Evolution of SARS-CoV-2 monitored through Gibbs energies of biosynthesis and antigen-receptor binding of Omicron BQ.1, BQ.1.1, XBB and XBB.1 variants. *Microbial Risk Analysis*, 100250. https://doi.org/10.1016/j.mran.2023.100250

У овом чланку је описана хемијска и термодинамичка анализа еволуције варијанти SARS-CoV-2. Нађено је да је за термодинамичку карактеризацију еволуције вируса SARS-CoV-2 неопходно познавати две величине: Гибсову енергију антиген-рецептор везивања и Гибсову енергију биосинтезе. Гибсова енергија везивања је физички *driving force* за везивање вируса за ћелију домаћина и улазак у ћелију домаћина. Везивање вируса са ћелију домаћина описано је хемијском реакцијом везивања, која је слична протеин-лиганд интеракцијама. Да би вирус могао да уђе у ћелију, мора имати негативну Гибсову енергију везивања. Што је она негативнија, то ће вирус брже улазити у ћелију домаћина и бити инфективнији. Када уђе у ћелију, вирус преузима њен метаболизам и почиње да се размножава. Умножавање вируса у ћелији може да се опише помоћу реакције биосинтезе. Реакција биосинтезе је хемијска реакција која описује производњу нових вирусних честица из хранљивих материја. Промена Гибсове енергије током реакције биосинтезе је Гибсова енергија биосинтезе. Гибсова енергија биосинтезе је физички *driving force* за размножавање

вируса унутар ћелије домаћина. Што је она негативнија, то ће вирус брже да се размножава у ћелији и доводи до већег оштећења ткива. Нађено је да *SARS-CoV-2* еволуира ка негативнијој Гибсовој енергији везивања и прибложно константној или мало мање негативној Гибсовој енергији биосинтезе. Ово значи да вирус еволуира према повећаној инфективности и константној или благо смањеној патогености. Ова предвиђања су анализирана са становишта теорије еволуције и нађено је да су у сагласности са њеним предвиђањима о акомодацији вируса на домаћина. Овај чланак се нашао у вестима у науци. Његов приказ дат је у чланку објављеног на *CN-Healthcare* порталу за научне вести.

Qianzhan Network (2023). The latest research: Different new coronavirus variant strains may have mixed infections! [Online] CN-Healthcare. Available at: https://www.cn-healthcare.com/articlewm/20230110/content-1496578.html (Accessed on January 15, 2023) (Translation of the original in Chinese: 前瞻网 (2023). 最新研究：不同新冠变异株毒株可能会出现混合感染现象！[Online] 健康界)

4. **Popovic, M.*** Stenning, G. B., Göttlein, A., & Minceva, M. (2021). Elemental composition, heat capacity from 2 to 300 K and derived thermodynamic functions of 5 microorganism species. *Journal of Biotechnology*, 331, 99-107. https://doi.org/10.1016/j.jbiotec.2021.03.006

У раду је по први пут извршено експериментално одређивање хемијске формуле и моларне ентропије живе материје бактерија. У овом раду су хемијски и термодинамички анализиране Грам-позитивне бактерије (*Streptococcus thermophilus*), Грам-негативне бактерије (*Escherichia coli, Pseudomonas fluorescens, Gluconobacter oxydans*) и гљиве (*Penicillium chrysogenum*). Бактерије су прво узгојене у лабораторији и припремљене за анализу. Онда им је одређен елементални састав користећи *CHN* и *ICP-OES* аналитичке методе. Затим им је измерен топлотни капацитет од 2 до 300 К, уз помоћ *relaxation low-temperature calorimetry*. На основу топлотног капацитета и елементалног састава, одређена је моларна ентропија. Експериментални подаци о топлотном капацитету и ентропији су анализирани помоћу биотермодинамичких метода: Батлијевог модела, Роелсовог модела, Коповог правила и Хурст-Харисоновог модела. Допринос кандидата укључује развој идеје за истраживање, развијање медодологије, валидација резултата, формална анализа резултата, истраживање и писање чланка (*Conceptualization, Methodology, Validation, Formal analysis, Investigation, Writing - original draft*, према *Contributor Roles Taxonomy - https://www.elsevier.com/authors/policies-and-guidelines/credit-author-statement*).

5. **Popovic, M.*** & Minceva, M. (2021). Standard thermodynamic properties, biosynthesis rates and the driving force of growth of 5 agricultural plants. *Frontiers in Plant Science*, 12, 871. https://doi.org/10.3389/fpls.2021.671868

У овом раду приказана су хемијска и термодинамичка разматрања фотосинтезе и раста биљака. Жива материја биљака је прво хемијски описана помоћу хемијских (емпиријских) формула. На основу емпиријских формула, нађене су енталпија, ентропија и Гибсова енергија живе материје биљака, помоћу Пател-Ериксоновог модела и Батлијевог модела. Затим су конструисане реакције биосинтезе за биљке – хемијске једначине које описују трансформацију хранљивих супстанци у живу материју. Нађено је да су њихове Гибсове енергије високо позитивне и да зато, да би биле физички могуће, оне морају бити спојене са процесима са високо негативним Гибсовим енергијама. Извор негативне Гибсове енергије је фотосинтеза. Гибсова енергија фотосинтезе нађена је на основу *RUE* вредности („*radiation use efficiency*“) из литературе. Гибсове енергије биосинтезе и фотосинтезе комбиноване су да се одреди Гибсова енергија раста - физички *driving force* за раст биљака. Гибсова енергија раста је затим повезана са брзином раста, помоћу феноменолошких једначина које припадају неравнотежној термодинамици, и одређени су феноменолошки коефицијенти. Гибсова енергија раста и феноменолошки коефицијенти су затим дискутовани са физиолошког аспекта: C3 и C4 фотосинтезе, и фиксације азота. Допринос кандидата: осмислио и испланирао истраживање, сакупио податке, анализирао и протумачио податке, и написао рад (*conceived and designed the research, collected the data, analyzed and interpreted the data, and wrote the manuscript*).

IV. АНАЛИЗА НАУЧНИХ РАДОВА

Истраживања др Марка Поповића су у следећим областима:

1. Хемијска карактеризација субцелуларних и целуларних микроорганизама, као и мултицелуларних организама.
2. Истраживање хемијских и термодинамичких особина интеракција микроорганизама са окружењем.
3. Термодинамичка карактеризација органских и неорганских материјала.
4. Хемијска и термодинамичка карактеризација хидролизе целулозе од стране микроорганизама.

Хемијска карактеризација субцелуларних и целуларних микроорганизама, као и мултицелуларних организама.

Године 2019, на почетку пандемије *COVID-19*, у литератури је била доступна хемијска формула за само један вирус – полиовирус. Др Марко Поповић је у коауторском раду 2020. године објављеном у часопису *Heliyon* први објавио емпиријске формуле (*unit carbon formula* или *C-mol formula*) за *SARS, MERS* и *SARS-CoV-2* вирусе (*Hu-1 wild type*) [M22-1.20]. Емпиријске формуле добијене су помоћу *atom counting* метода за који је кандидат направио програм. *Atom counting* метод је описан у раду објављеном у часопису *Computational Biology and Chemistry* (ИФ 3.737, M22) [M22-1.18]. Током трајања *COVID-19* пандемије, *SARS-CoV-2* је мутирао више десетина пута и на тај начин еволуирао у више десетина варијанти. Др Марко Поповић је први пут одредио емпиријске формуле за све сојеве *SARS-CoV-2* у чланцима [M21-1.2; M22-1.11; M22-13; M22-1.15; M22-1.18; M22-

1.20; M23-1.26; M23-1.27; M23-1.28]. Истраживање елементалног састава вируса је проширено и на друге вирусе. Кандидат је такође одредио хемијске (емпиријске) формуле за *Ebola virus* [M23-1.11], *MPXV* [M23-1.30], *Vaccinia virus* [M23-1.30] и бактериофаге [M23-1.29]. На основу хемијских формула, кандидат је формулисао реакције биосинтезе за све анализиране вирусе, које су објављене у радовима: [M21-1.2; M21-1.3; M22-1.11; M22-1.12; M22-1.13; M22-1.15; M22-1.20; M22-1.21; M23-1.26; M23-1.27; M23-1.28; M23-1.29; M23-1.30]. Кандидат је одредио и термодинамичке особине (енталпија, ентропија, Гибсова енергија формирања и биосинтезе) за све поменуте вирусе. Прикази о истраживању кандидата објављени су на порталима за промоцију науке *News Medical* и *CN-Healthcare*:

- Sidharthan, C. (2022). Increased Gibbs energy of binding indicates greater infectivity of SARS-CoV-2 BA.2.75. [Online] News Medical. Available at: https://www.news-medical.net/news/20221027/Increased-Gibbs-energy-of-binding-indicates-greater-infectivity-of-SARS-CoV-2-BA275.aspx (Accessed on November 19, 2022)
- Qianzhan Network (2023). The latest research: Different new coronavirus variant strains may have mixed infections! [Online] CN-Healthcare. Available at: https://www.cn-healthcare.com/articlewm/20230110/content-1496578.html (Accessed on January 15, 2023) (Translation of the original in Chinese: 前瞻网 (2023). 最新研究：不同新冠变异株毒株可能会出现混合感染现象！[Online] 健康界)

Радови др Марка Поповића на тему хемијске карактеризације вируса [M22-1.20; M22-1.21] су цитирани око 50 пута у међународним научним часописима.

Др Марко Поповић је истраживао и радио на хемијској и термодинамичкој карактеризацији једноћелијских микроорганизама. У раду објављеном у часопису *Heliyon* (ИФ 3.776, M22) извршио је хемијску и термодинамичку карактеризацију за 32 врсте микроорганизама [M22-1.23]. Одређене су емпиријске формуле и термодинамичке особине за 32 врсте микроорганизама. На основу емпиријске формуле израчунате су термодинамичке особине: енталпија, ентропија и Гибсова енергија. Енталпија микроорганизама је нађена помоћу Пател-Ериксоновог модела (*Patel-Erickson model*). Пател-Ериксонов модел, такође познат као Торнтоново правило (*Thornton's rule*), каже да је енталпија микроорганизама збир доприноса елемената који улазе у њихов састав. Ентропија је нађена помоћу Батлијевог модела (*Battley model*). Батлијев модел даје ентропију микроорганизама као збир ентропија свих елемената који улазе у њихов састав помножен константом која узима у обзир окружење атома у живој материји. Гибсова енергија је нађена из енталпије и ентропије. Једна од идеја овог рада је да свака врста микроорганизама има специфичну емпиријску формулу и термодинамичке особине. Рад је цитиран 35 пута у последње 3 године, према *Scopus* бази података (без аутоцитата). На основу ове идеје, *Degueldre* је предложио метод за брзу идентификацију микроорганизама помоћу *ICP-MS* методе:

> Degueldre, C. (2021). Single virus inductively coupled plasma mass spectroscopy analysis: A comprehensive study. *Talanta*, *228*, 122211. https://doi.org/10.1016/j.talanta.2021.122211

Др Марко Поповић је први експериментално одредио емпиријске формуле и термодинамичке особине за 5 врста микроорганизама у часопису *Journal of Biotechnology* (ИФ 4.122, М22) [М22-1.19]. Ентропија је одређена у сарадњи са *Rutherford Appleton Laboratory*, помоћу *low temperature calorimetry* методе. Емпиријске формуле су такође одређене експериментално помоћу *CHN analysis* и *ICP-OES* метода, на *Technical University of Munich*. На тај начин извршена је хемијска и термодинамичка карактеризација за око 40 различитих једноћелијских микроорганизама.

Кандидат је објавио термодинамичке особине за вишећелијске организме: биљке и људска ткива. Емпиријске формуле и термодинамичке особине одређене су за 5 биљних врста и публиковане у часопису *Frontiers in Plant Science* (ИФ 7.255, М21а) [М21а-1.1]. Такође, први пут су одређене емпиријске формуле и термодинамичке особине 20 хуманих ткива [М22-1.22]. Резултати су објављени у часопису *Thermal Science* (ИФ 1.541, М22).

Истраживање хемијских и термодинамичких особина интеракција микроорганизама са окружењем.

Вирус-домаћин интеракција је описана веома добро у литератури из угла биологије. Ипак, *driving force* и механистички модели су по први пут описани од стране кандидата у чланку [М22-1.21] у часопису *Heliyon* (ИФ 3.776, М22). Такође познато је емпиријски да ако се два вируса или бактерије нађу у исто време на истом месту, они се такмиче за ресурсе. Ово резултује у појави коинфекције или интерференције. Ипак, механизми који омогућавају ове појаве нису били познати. Кандидат је развио механистички модел у ком се разматрају компетитивне реакције биосинтезе организма домаћина и патогена, који је објављен у чланку у часопису *Microorganisms* (ИФ 4.152; М21) [М21-1.4]. У току ове интеракције реакција биосинтезе која је окарактерисана већом негативном Гибсовом енергијом има предност у интеракцији, што резултира у преузимању метаболичке машинерије организма домаћина [М22-1.21]. На тај начин добро позната појава „отимања“ метаболичких путева је добила своје биотермодинамичко објашњење. Наиме, реакција транскрипције представља реакцију полимеризације у хемијском смислу. Зато транскрипције *RNA* ћелије домаћина и вируса представљају компетитивне реакције, пошто обе реакције користе исте ресурсе. Реакције полимеризације су вођене Гибсовом енергијом биосинтезе. Зато је кандидат у овом раду предложио да нижа Гибсова енергија биосинтезе представља одлучујући фактор у преузимању метаболизма од стране патогена.

Антиген-рецептор интеракција такође представља хемијску реакцију сличну протеин-лиганд интеракцији. *Driving force* и за ову интеракцију представља негативнија Гибсова енергија везивања. Овај механистички модел кандидат је представио у [М22-1.17]. Гибсове енергија везивања за различите варијанте *SARS-CoV-2* кандидат је објавио у [М21-1.2; М22-1.11; М22-1.12; М22-1.13; М22-1.14; М22-1.15; М22-1.16; М22-1.17; М23-1.26; М23-1.27; М23-1.28]. Утицај различитих Гибсових енергија везивања и биосинтезе на инфективност и патогеност су били предмет истраживања канидта. Модел овог утицаја је објављен у раду [М21-1.3], у часопису *Vaccines* (ИФ 5.513, М21).

Аутор се бавио истраживањем на пољу развоја механистичког модела за феномене интерференције и коинфекције. У чланцима [M21-1.4; M23-1.27] представљен је хемијско-кинетички и биотермодинамички модел који карактерише ове две појаве. У њему се предлаже да је брзина хемијске реакције антиген-рецептор везивања и брзина хемијске реакције полимеризације нуклеотида у нуклеинску киселину и амино киселина у протеине представљају одлучујући фактор који одређује који ће микроорганизам доминирати у компетицији при интеракцији са организмом домаћина. На тај начин, објашњено је зашто је током 2020. и 2021. изостала епидемија грипа у току *COVID-19* пандемије [M21-1.4]. Током овог истраживања, кандидат је повезао биолошки феномен мутације са хемијским феноменом промена елементалног састава и термодинамичким променама у ентропији, енталпији и Гибсовој енергији, које се одражавају на хемијско-кинетичке промене у брзини везивања и брзини биосинтезе градивних компоненти микроорганизма, која на крају резултује променама у биолошким особинама инфективности и патогености.

Кандидат се бавио и истраживањима у области хемијског и термодинамичког механизма процеса еволуције вируса. Закључено је да вирус еволуира путем случајних мутација које резултују у промени елементалног састава, темодинамичких особина и хемијско-кинетичких особина у правцу боље адаптације на окружење и преживљавања, путем снижења Гибсове енергије везивања и одржавања или повећања Гибсове енергије раста. На овај начин вирус повећава инфективност и одржава или смањује патогеност што му омогућава опстанак. У чланцима [M22-1.12; M22-1.13; M22-1.14; M22-1.15; M22-1.16; M22-1.17] показано је да је *SARS-CoV-2* током времена еволуирао према више негативној Гибсовој енергији везивања и одржавању константне Гибсове енергије биосинтезе. Анализа временске еволуције вируса дата је у [M22-1.12].

Термодинамичка карактеризација органских и неорганских материјала.

Др Марко Поповић се бавио термодинамичком карактеризацијом органских и неорганских материјала. Од органских материјала бавио се алифатичним олиго-уретаном, док се од неорганских бавио оксидима церијума са додацима самаријума и неодимијума. Кандидат је експериментално анализирао ове материјале помоћу *low temperature calorimetry* методе, и теоријски анализирао резултате.

Алифатични олиго-уретани су материјали са особинама добрим за прављење влакана. У циљу да се проучи њихова молекулска структура и међумолекулске интеракције, урађена је термодинамичка анализа. Калориметријска мерења су урађена помоћу *low temperature calorimetry* методе на *Physical Properties Measurement System* инструменту. Резултати калориметријских мерења су анализирани помоћу физичко-хемијских модела материјала. Употребљени су Дебајев и Ајнштајнов модел. На основу њих су нађени молекулски параметри ових материјала, као што је Дебајева температура. Резултати истраживања су објављени у часопису *Journal of Chemical Thermodynamics* (ИФ 2.784, M21) [рад M21-1.9].

Оксиди церијума са додацима самаријума и неодимијума, *SNDC*, (*samaria and neodymia doped ceria - SNDC*) су материјали који су занимљиви због кристалних дефеката због којих могу бити корисни за развој *Solid oxide fuel cell* технологија. Ови дефекти настају када се

Sm^{3+} или Nd^{3+} јон нађе у кристалној решетки на месту Ce^{4+} јона. Пошто су Sm^{3+} и Nd^{3+} јони мањег наелектрисања од Ce^{4+}, мање анјона је потребно у кристалној решетки да неутрализује наелектрисање катјона и на њиховом месту настаће празнине – кристални дефекти. Ови дефекти у *SNDC* материјалима имају особину да се организују у кристалној решетки. Такође, кроз ове празнине у кристалној решетки могу се кретати јони кисеоника, што чини ове материјале занимљивим као електролит за развој *Solid oxide fuel cell* технологија.

Да би боље изучио организацију кристалних дефеката у *SNDC* материјалима кандидат је вршио експериментална калориметријска мерења помоћу помоћу *low temperature calorimetry* методе на *Physical Properties Measurement System* инструменту. Мерења топлотног капацитета вршена су у опсегу од 2 до 300 К. Резултати су подељени у три региона:

1. Регион ниске температуре од 2 до 20 К.
2. Регион средње температуре од 20 до 50 К.
3. Регион високе температуре од 50 до 300 К.

Регион ниске температуре анализиран је теоријски помоћу модела физичке хемије материјала - модела за топлотни капацитет кристалних дефеката и проширеног Дебајевог-T^3 модела топлотног капацитета кристалне решетке. Регион средње температуре је анализиран теоријски помоћу полиномских модела. Ови модели се користе да омогуће боље преклапање између ниског и високог региона. Регион високе температуре је анализиран помоћу Дебајевог и Ајнштајновог модела.

Нађено је да ови материјали такође показују пик у топлотном капацитету испод 5 К. Овај пик потиче од нуклеарне Шоткијеве аномалије (*nuclear Schottky anomaly*). Језгра атома самаријума и неодимијума имају магнетне моменте који интерагују између себе и са електронима. Зато различита усмерења магнетних момената језгара доводе до различитих енергетских стања језгара. Изнад аномалије, језгра поседују велику количину енергије и могу да заузму сва енергетска стања. Али испод аномалије, језгра немају довољно енергије да пређу у сва енергетска стања и зато заузимају најниже енергетско стање. Ово доводи до ефекта сличног фазном прелазу, који региструјемо као Шоткијеву аномалију. Ова аномалија је моделована помоћу Шоткијевог модела. Из Шоткијевог параметра нађено је локално магнетно поље које окружује језгра самаријума и неодимијума. Нађено је да су језгра самаријума окружена јачим магнетним пољем, што је хемијски објашњено већим бројем електрона који их окружује.

Такође је нађен допринос дефеката кристалне решетке топлотном капацитету *SNDC* материјала. Нађено је да је он нижи него што би требао да буде на основу стехиометријске количине кристалних дефеката у узорку. Ово је објашњено помоћу организације кристалних дефеката. Резултати истраживања су објављени у часописима *Acta Materialia* (ИФ 9.277, М21) [М21-1.6] и *Journal of Chemical Thermodynamics* (ИФ 2.888, М21) [Н21-1.5].

Хемијска и термодинамичка карактеризација хидролизе целулозе од стране микроорганизама.

Кандидат је хемијски и термодинамички анализирао хидролизу целулозе до глукозе у циљу побољшања еколошких поступака за добијање енергије и хемикалија. Развијање обновљивих облика енергије и еколошке хемијске производње су велики изазови за науку. Целулоза представља молекул богат енергијом који је доступан у великим количинама у природи. Такође, она се може трансформисати помоћу биотехнолошких поступака у друга корисна једињења. Ипак примена целулозе веома је ограничена њеном хидролизом која се тешко постиже. У циљу решавања овог проблема, кандидат је радио на хидролизи целулозе до глукозе. Да би се нашли оптимални услови за овај процес, урађена је хемијска и термодинамичка анализа овог процеса. Резултати су објављени у [M21-1.7].

Хидролиза целулозе се врши у биореактору помоћу микроорганизама као катализатора. Субстрат је целулоза, а производ водени раствор глукозе. Анализа је рађена на аморфној целулози, целулози 1, 2 и 3. Овај процес је помоћу Хесовог закона подељен на три дела:

1. Хидролизу целулозе до чврсте глукозе.
2. Растварање чврсте глукозе у води и прављење засићеног раствора.
3. Разблаживање засићеног раствора до концентрације на крају хидролизе.

Збир ова три дела даје укупну реакцију хидролизе целулозе. Гибсова енергија је одређена за сваки део.

Анализа хидролозе целулозе је урађена у опсегу до 0°C до 100°C. Прво су у литератури нађени подаци за чврсту целулозу на 25°C. Затим су коришћени Дебајев и Ајнштајнов модели материјала да се нађу термодинамичке особине целулозе под условима за хидролизу. Затим је састављена реакција хидролизе. На основу реакције хидролизе и нађених термодинамичких параметара целулозе, одређени су њени термодинамички параметри хидролизе до чврсте глукозе: енталпија, ентропија, Гибсова енергија и топлотни капацитет.

Следећи разматрани процес је растварање настале глукозе у води. У овом делу чврста глукоза се раствара и даје засићен раствор. Овај део је анализиран помоћу термодинамике раствора. Прво су у литератури нађени подаци о растворљивости глукозе у води. На основу њих нађена је константа равнотеже за овај процес. Из константе равнотеже нађена је енталпија растварања помоћу ван’т Хофовог дијаграма. Такође, из константе равнотеже нађена је и Гибсова енергија растварања глукозе. Из Гибсове енергије и енталпије нађена је ентропија растварања.

Трећи део је разблаживање глукозе до концентрације на крају хидролизе. Овај процес је анализиран помоћу термодинамике раствора и модела за коефицијенте активитета. Прво су нађени у литератури подаци о напону паре за растворе глукозе. Из њих су нађени коефицијенти активитета помоћу Рауловог закона. Коефицијенти активитета су затим анализирани помоћу Маргулесовог модела (*Margules model*). На основу Маргулесовог модела нађене су енталпија, ентропија и Гибсова енергија разблаживања.

На основу резултата нађено је да се највећи принос глукозе добија из аморфне целулозе и целулозе 3. За целулозу 1 и 2 је нађено да се принос може повећати ако се оне уситне до аморфне целулозе. Такође је нађено да је процес термодинамички ефикаснији на вишој температури. Из овога је закључено да су најбољи кандидати за извођење биокаталитичке хидролозе целулозе термофилни микроорганизми.

V. 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).

1.1. Награде и признања за научни рад додељене од стране релевантних научних институција и друштава

Др Марко Поповић награђиван је домаћим и међународним признањима за свој научни рад. Ова признања укључују

- 2023 *Highly Cited Papers of Microorganisms* додељена од *MDPI* (в. прилог под редним бројем 2.1)
- 2022 *Elsevier certificate for publishing 3 open access articles with 1 linked to UN Sustainable Development Goal 3: "Ensure healthy lives and promote well-being for all at all ages"* (в. Прилог под редним бројем 2.2)
- 2014 *The High Impact Doctoral Research Assistantship - HIDRA* - додељена од *BYU* (в. Прилоге под редним бројевима 2.3 и 2.4)
- 2013 Награда за изузетан успех током студија хемије, додељена од Српског Хемијског Друштва (в. Прилог под редним бројем 2.5)
- 2012 Награда за најбољи студентски научно-истраживачки рад Београдског Универзитета (в. Прилог под редним бројем 2.6)
- 2011 *The William F. Giauque Memorial Award* додељен од *66th North American Calorimetry Conference* (*CALCON*) (в. Прилог под редним бројем 2.7)
- 2010 *Travel grant for 21st ICCT 2010, Tsukuba, Japan* додељен од *International Association of Chemical Thermodynamics* (*IACT*) (в. Прилог под редним бројем 2.8)

1.2. Уводна предавања на научним конференцијама и друга предавања по позиву

Кандидат је одржао семинар од 2 предавања на *University of Santiago de Compostela* у Шпанији, у новембру 2022. године:

- *"European and American Options for Developing a Research Career."* (в. прилог под редним бројем 3.1)
- *"Biothermodynamic background of plant growth and aging."* (в. прилог под редним бројем 3.2)

1.3. Чланства у одборима научних друштава

Др Марко Поповић је члан управног одбора међународног научног друштва *International Society for Biological Calorimetry (ISBC)*, од јуна 2022 године.

1.4. Чланства у уређивачким одборима часописа

Кандидат је члан *Associate Editorial Board* међународног научног часописа *Frontiers in Plant Science*, који је од стране Министарства науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије рангиран као међународни часопис изузетне вредности (M21a). (в. прилог под редним бројем 3.3 и https://www.frontiersin.org/journals/plant-science/sections/plant-biophysics-and-modeling/editors)

1.5. Рецензије научних радова

Кандидат је рецензирао радове у међународним научним часописима: *The Lancet Regional Health - Southeast Asia (Elsevier); Scientific Reports (Nature Research); Energy storage (Wiley); Microbial Risk Analysis (Elsevier) Applied sciences (MDPI); Physica A (Elsevier); Talanta (Elsevier); Acta Biotheoretica (Springer); Journal of Theoretical Biology (Elsevier); Journal of Biosafety and Biosecurity (Elsevier); Systems Research and Behavioral Science (Wiley); Ageing Research Reviews (Elsevier); Proceedings A (Royal Society); Journal of the Serbian Chemical Society.* (в. прилоге под редним бројевима 3.4-3.11)

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).

2.1. *Педагошки рад*

Кандидат је учествовао у извођењу наставе, у Европи (Немачка, Холандија, Чешка, Естонија) и Сједињеним Америчким Државама.

Током школске године 2021/22, у сарадњи са проф др *Urs von Stockar*, развио је и одржао један од првих курсева на тему биотермодинамике у Европи. Курс је победио на конкурсу 2021 *EuroTeQ Teaching Fund* и био финансиран од стране Европске комисије и Немачке службе за академску размену (*DAAD*). Предаван је у 4 европске земље на *EuroTeQ Engineering University*. (в. прилог под редним бројем 4.1)

Кандидат је учествовао у извођењу наставе из 8 предмета као асистент, на *Brigham Young University*, САД. (в. прилог под редним бројем 4.2)

2.2. Менторски рад

Кандидат је био ментор једног *Erasmus+* студента на *Technical University of Munich*, током школске године 2021/22. Студент је обучен теоријским основама биотермодинамике, њеној примени, као и *vapor-liquid equilibrium* експерименталним мерењима, помоћу *Illudest 601* инструмента. (в. прилог под редним бројем 4.3)

2.3. Међународна сарадња

Током каријере, кандидат је сарађивао са еминентним истраживачима из Европе, Сједињених Америчких Држава и Аустралије.

У сарадњи са проф др *Nieves Barros* са *University of Santiago de Compostela* (Шпанија), бавио се елементалним саставом, биотермодинамиком и биоенергетиком органске материје из земљишта (*soil organic matter*, *SOM*). Истраживање је обухватало коришћење података добијених елементалном хемијском анализом помоћу *CHN* и *ICP-OES* метода, експерименталним мерењем енталпије *TGA-DSC* методом и моделовањем. Резултати истраживања су представљени на *2023 General Assembly of the European Geosciences Union*. (в. прилог под редним бројем 4.4)

У сарадњи са проф др *Richard Head* са *University of South Australia* и проф др *Jennifer Martin* са *University of Newcastle* (Аустралија), анализирао је инфекцију вирусом *SARS-CoV-2* биофизичким методама. Разматран је процес дифузије вирусних честица кроз слуз дисајних путева и њихово везивање за рецепторе и улазак у ћелије домаћина. Анализа представља спој биофизике и биолошких наука. (в. прилог под редним бројем 4.5)

У сарадњи са проф др *Urs von Stockar* са *École Polytechnique Fédérale de Lausanne* (Швајцарска), радио је на развоју наставног курса на тему биотермодинамике. Ово је један од првих наставних програма на тему биотермодинамике у Европи и први који се фокусира на биотермодинамику организама. Програм је победио на међународном конкурсу 2021 *EuroTeQ Teaching Fund* и био подржан од стране Европске комисије и Немачке службе за академску размену (*DAAD*). Био је одржан на универзитетима у 4 европске земље. (в. прилог под редним бројем 4.1)

У сарадњи са др *Gavin Stenning* са *Rutherford Appleton Laboratory* (Велика Британија), остварио је прво икад експериментално мерење моларне ентропије живе материје

бактерија. Мерења су извршена помоћу *Physical properties measurement system* релаксационог нискотемпературног калориметра. Резултати су анализирани помоћу модела физике чврстог стања: Дебајевог модела кристалне решетке, Ајнштајновог модела кристалне решетке, полиномских модела и проширеног Дебајевог T^3 модела. Резултати су објављени у међународном научном часопису *Journal of Biotechnology* (ИФ 4.122, М22, *Biotechnology & Applied Microbiology* 64/161; рад [М22-1.19]).

У сарадњи са проф др *Alexandra Navrotsky* са *University of California – Davies* (САД), радио је на термодинамичкој карактеризацији оксида церијума са додацима самаријума и неодимијума. Нови материјал је интересантан због занимљивог понашања кристалних дефеката који могу бити основа за развој система за складиштење великих количина енергије. Мерења су извршена помоћу *Physical properties measurement system* релаксационог нискотемпературног калориметра. Резултати су анализирани помоћу модела физике чврстог стања: Дебајевог модела кристалне решетке, Ајнштајновог модела кристалне решетке, полиномских модела, проширеног Дебајевог T^3 модела и модела за топлотни капацитет кристалних дефеката. Резултати су објављени у међународним научним часописима *Acta Materialia* (ИФ 9.277, М21а, *Metallurgy & Metallurgical Engineering* 1/80, рад [М21-1.6]) и *Journal of Chemical Thermodynamics* (ИФ 2.888, М21, *Thermodynamics* 14/61 рад [М21-1.5]). (в. прилог под редним бројем 4.6)

Са проф др *Marek Pyda* са *Rzeszów University of Technology* (Пољска) учествовао је у термодинамичкој карактеризацији олигоуретанских полимера. Мерења су извршена помоћу *Physical properties measurement system* релаксационог нискотемпературног калориметра. Резултати су анализирани помоћу модела физике чврстог стања: Дебајевог модела кристалне решетке, Ајнштајновог модела кристалне решетке, полиномских модела и проширеног Дебајевог T^3 модела. Резултати су публиковани у међународном научном часопису *Journal of Chemical Thermodynamics* (ИФ 2.784, М21, *Thermodynamics* 12/58; рад [М21-1.9]).

У сарадњи са проф др *Christophe Coquelet* са *École nationale supérieure des mines de Paris* (Француска), радио је на изради програма за моделовање равнотеже фаза. Моделовање је вршено помоћу *Soave-Redlich-Kwong* (*SRK*), *Peng-Robinson* (*PR*) и *Cubic Plus Association* (*CPA*) једначина стања. Резултати су објављени у међународном научном часопису *Fluid Phase Equilibria* (ИФ: 2.379, М21, *Thermodynamics*, 6/55; рад [М21-1.10])

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).

3.1. Руковођење пројектима, потпројектима и задацима

У оквиру пројекта *SPREX-H2S* финансираног од стране *IFPEN*, Марко Поповић је руководио подпројектом „Развијање математичко-физичког програма за интерпретацију равнотеже фаза помоћу *Soave-Redlich-Kwong* и *Cubic-plus-association* једначина стања“. Резултати истраживања су примењени на реалним системима и објављени у међународном научном часопису *Fluid Phase Equilibria* (рад [M21-1.10]):

> Coquelet, C., Valtz, A., Stringari, P., Popovic, M., Richon, D., & Mougin, P. (2014). Phase equilibrium data for the hydrogen sulphide+ methane system at temperatures from 186 to 313 K and pressures up to about 14 MPa. *Fluid Phase Equilibria*, *383*, 94-99. https://doi.org/10.1016/j.fluid.2014.09.025

Потврда руководиоца пројекта проф др *Christophe Coquelet* дата је у прилогу 5.1.

Др Марко Поповић је руководио тимом који је испитивао хемијску и термодинамичку карактеризацију биомасе микроорганизама. Тим су чинили истраживачи из Немачке и Велике Британије. Анализирали су биомасу насталу из микроорганизама помоћу *low temperature calorimetry* метода и из експерименталних података дефинисали теоријске моделе. Резултати истраживања су објављени у раду [M22-1.19]:

> **Popovic, M.*** Stenning, G. B., Göttlein, A., & Minceva, M. (2021). Elemental composition, heat capacity from 2 to 300 K and derived thermodynamic functions of 5 microorganism species. *Journal of Biotechnology*, *331*, 99-107. https://doi.org/10.1016/j.jbiotec.2021.03.006

Допринос др Марка Поповића укључује: развој идеје за истраживање, избор методологије, валидацију резултата, формална анализа резултата, као и писање научне публикације (*Conceptualization, Methodology, Validation, Formal analysis, Investigation, Writing - original draft*, према *Contributor Roles Taxonomy - https://www.elsevier.com/authors/policies-and-guidelines/credit-author-statement*).

3.2. Технолошки пројекти, патенти, иновације и резултати примењени у пракси

Др Марко Поповић развио је *atom counting* метод за одређивање хемијског састава вирусних честица, користећи генетске секвенце, секвенце протеина и морфологију вируса. *Atom counting* метод се имплементира помоћу компјутерског програма. Програм пролази кроз генетске и протеинске секвенце, који представљају биополимере. Биополимери се састоје од мономера: нуклеотида или аминокиселина. Сваки од ових мономера има прецизно дефинисан елементални састав. Тако да програм иде кроз секвенце биополимера и сабира атоме који долазе од мономера који их сачињавају. На тај начин одређује елементални састав молекула полимера. Затим се број атома из сваког биополимера множи његовим бројем копија у вирусној честици, да би се увидео његов допринос саставу вируса. *Atom counting* метод примењен је на бројне вирусе, укључујући све важније варијанте *SARS-CoV-2* (*Hu-1, Delta B.1.617.2, Omicron BA.1, Omicron BA.2, Omicron BA.3, Omicron BA.4, Omicron BA.5, Omicron BA.2.75, Omicron BQ.1, Omicron BQ.1.1, Omicron XBB, Omicron XBB.1, Omicron XBB.1.5, Omicron BA.5.2, Omicron BF.7*), *SARS-CoV, MERS-*

CoV, Ebola virus, MPXV, Vaccinia virus, бактериофагове и вироиде. Детаљан опис метода може се наћи у публикацији (рад [M22-1.18])

> Popovic, M.* (2022). Atom counting method for determining elemental composition of viruses and its applications in biothermodynamics and environmental science. Computational Biology and Chemistry, 96, 107621. https://doi.org/10.1016/j.compbiolchem.2022.107621

Овај метод је добро прихваћен у међународној научној јавности и примењен је од стране других истраживача, на пример

> Şimşek, B., Özilgen, M., & Utku, F. Ş. (2021). How much energy is stored in SARS-CoV-2 and its structural elements?. Energy Storage, e298. https://doi.org/10.1002/est2.298

> Degueldre, C. (2021). Single virus inductively coupled plasma mass spectroscopy analysis: A comprehensive study. *Talanta*, *228*, 122211. https://doi.org/10.1016/j.talanta.2021.122211

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).

4.1. Утицајност

Др Марко Поповић се бави биотермодинамичком и биоенергетском анализом организама, животних процеса и интеракција међу организмима. Један је од првих истраживача који су применили биотермодинамику на вирусе и вироиде. Такође је развио *atom counting* метод за одређивање елементалог састава вирусних честица на основу генетских секвенци, протеинских секвенци и морфологије. Овај метод су примењивали и други истраживачи, на пример

> Şimşek, B., Özilgen, M., & Utku, F. Ş. (2022). How much energy is stored in SARS-CoV-2 and its structural elements?. *Energy Storage*, *4*(2), e298. https://doi.org/10.1002/est2.298

> Degueldre, C. (2021). Single virus inductively coupled plasma mass spectroscopy analysis: A comprehensive study. *Talanta*, *228*, 122211. https://doi.org/10.1016/j.talanta.2021.122211

Кандидат је аутор 39 библиографске јединице (први аутор на 31 публикација и кореспондентни аутор на 30 публикација), од којих (према *Правилнику о стицању истраживачких и научних звања*, "Службени гласник РС", бр.159/2020 и бр. 14/2023): 1 рад у међународним часописима изузетне вредности M21a, 9 радова у врхунским међународним часописима M21, 15 радова у истакнутим међународним часописима M22, 7 радова у међународним часописима M23, 1 саопштење са међународног скупа штампано у целини M33, 2 саопштења са међународних скупова штампана у изводу M34 и 2 рада у

националним часописима М53. Радови кандидата су цитирани 408 пута и *h-index* 13, према *Scopus* бази података (на дан 10.05.2023), односно 143 цитата и *h-index* 7 без аутоцитата (на дан 10.05.2023).

Истраживање кандидата је такође било поменуто и у медијима. Рад [4.1]

> **Popovic, M.*** (2022). Omicron BA.2.75 subvariant of SARS-CoV-2 is expected to have the greatest infectivity compared with the competing BA.2 and BA.5, due to most negative Gibbs energy of binding. BioTech, 11(4), 45. https://doi.org/10.3390/biotech11040045

Приказан је на порталу за промоцију науке *News Medical.*

> Sidharthan, C. (2022). Increased Gibbs energy of binding indicates greater infectivity of SARS-CoV-2 BA.2.75. [Online] News Medical. Available at: https://www.news-medical.net/news/20221027/Increased-Gibbs-energy-of-binding-indicates-greater-infectivity-of-SARS-CoV-2-BA275.aspx (Accessed on November 19, 2022)

Такође, рад [M23-1.27]

> **Popovic, M.*** (2023). Never ending story? Evolution of SARS-CoV-2 monitored through Gibbs energies of biosynthesis and antigen-receptor binding of Omicron BQ.1, BQ.1.1, XBB and XBB.1 variants. Microbial Risk Analysis, 100250. https://doi.org/10.1016/j.mran.2023.100250

Приказан је на порталу за промоцију науке *CN-Healthcare*.

> Qianzhan Network (2023). The latest research: Different new coronavirus variant strains may have mixed infections! [Online] CN-Healthcare. Available at: https://www.cn-healthcare.com/articlewm/20230110/content-1496578.html (Accessed on January 15, 2023) (Translation of the original in Chinese: 前瞻网 (2023). 最新研究：不同新冠变异株毒株可能会出现混合感染现象！[Online] 健康界)

У сарадњи са научно популарном списатељицом *Jesslyn Shields*, др Марко Поповић је помогао у писању чланка "*Entropy: The Invisible Force That Brings Disorder to the Universe*". Чланак је објављен на сајту за промоцију науке *HowStuffWorks.com* (https://science.howstuffworks.com/entropy.htm#:~:text=Entropy%20is%20a%20measure%20of,in%20the%20form%20of%20heat).

4.2. Параметри квалитета часописа и позитивна цитираност кандидатових радова

У досадашњем раду, др Марко Поповић остварио је запажене резултате, што се види из броја објављених радова као и из цитираности у међународним научним часописима. Током каријере, кандидат је објавио:

- 1 (један) рад у међународном часопису изузетне вредности (М21а)
- 9 (девет) радова у врхунским међународним часописима (М21)
- 15 (петнаест) радова у истакнутим међународним часописима (М22)

- 7 (седам) радова у међународним часописима (М23)

Збир импакт фактора за објављене радове је 105.18.

Због мултидисциплинарне природе истраживања, кандидат је цитиран од стране научника из разних области: биотермодинамика, биоенергетика, микробиологија, вирологија, епидемиологија, физиологија, фармакологија, молекуларна биологија, биотехнологија, биоинжењерство, хемија материјала, одржива економија, биоинформатика, хемија животне средине, наука о земљишту, екологија, еволуциона биологија, неравнотежна термодинамика, хемијско инжењерство и равнотежа фаза.

Радови су цитирани у позитивном смислу. Цитирани су у неким од најпрестижнијих научних публикација: *Chemical Reviews* (ИФ 72.087, М21а, *Chemistry, Multidisciplinary* 1/180), *Nature Catalysis* (ИФ 47.253, М21а, *Chemistry, Physical* 3/165), *Trends in Biotechnology* (ИФ 21.942, М21а, *Biotechnology & Applied Microbiology* 3/161), *Nature Communications* (ИФ 17.763, М21а, *Multidisciplinary Sciences* 6/74), *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* (ИФ 12.779, М21а, *Multidisciplinary Sciences* 7/74) и *Physical Review B* (ИФ 3.908, М21, *Physics, Applied* 41/160). Изабрани цитати:

Shah, M. S., Tsapatsis, M., & Siepmann, J. I. (2017). Hydrogen sulfide capture: from absorption in polar liquids to oxide, zeolite, and metal–organic framework adsorbents and membranes. *Chemical Reviews*, *117*(14), 9755-9803. https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.7b00095

Li, F., Yuan, L., Lu, H., Li, G., Chen, Y., Engqvist, M. K., ... & Nielsen, J. (2022). Deep learning-based k cat prediction enables improved enzyme-constrained model reconstruction. *Nature Catalysis*, *5*(8), 662-672. https://doi.org/10.1038/s41929-022-00798-z

Elzinga, M., de Haan, D., Buisman, C. J., ter Heijne, A., & Klok, J. B. (2023). Nutrient recovery and pollutant removal during renewable fuel production: opportunities and challenges. *Trends in Biotechnology*. https://doi.org/10.1016/j.tibtech.2022.12.016

Sośnicka, M., & Lüders, V. (2021). Phase transitions in natural COHNS fluid inclusions-implications for gas mixtures and the behavior of solid H2S at low temperatures. *Nature Communications*, *12*(1), 6975. https://doi.org/10.1038/s41467-021-27269-6

Calabrese, S., Chakrawal, A., Manzoni, S., & Van Cappellen, P. (2021). Energetic scaling in microbial growth. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 118*(47), e2107668118. https://doi.org/10.1073/pnas.2107668118

Levy, U., & Silberberg, Y. (2018). Equilibrium temperatures of discrete nonlinear systems. *Physical Review B*, 98(6), 060303. https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.98.060303

Комплетна листа цитата наведена је у одвојеном документу који је приложен.

4.3. Ефективни број радова и број радова нормиран на основу броја коаутора

Др Марко Поповић је током каријере објавио 43 библиографске јединице, а у последњих 10 година објавио је 39 библиографских јединица, од којих: 1 рад у међународним часописима изузетне вредности М21а, 9 радова у врхунским међународним часописима М21, 15 радова у истакнутим међународним часописима М22, 7 радова у међународним часописима М23, 1 саопштење са међународног скупа штампано у целини (М33), 2 саопштења са међународног скупа штампано у изводу (М34) и 2 рада у националним часописима (М53). Од тога је коаутор на 2 експериментална рада у природно-математичким наукама са преко 7 аутора. Први рад је, који подлежу нормирању на основу *Правилника о стицању истраживачких и научних звања*.

Рад [М21-1.6]:

> Neilsen, G., Rosen, P.F., Dickson, M.S., **Popovic, M.**, Schliesser, J., Hansen, L.D. Navrotsky, A. and Woodfield, B.W.* (2020). Quantifying oxygen vacancies in neodymium and samarium doped ceria from heat capacity measurements. *Acta Materialia*, 188, 740-744. https://doi.org/10.1016/j.actamat.2020.02.055

Објављен је у часопису *Acta Materialia* који је индексиран као врхунски међународни часопис (М21). На раду има н = 8 аутора. Стога, нормиран број бодова је

К/(1+0.2(н-7)) = 8/(1+0.2(8-7)) = 6.67

Други рад је [М21-1.5]:

> Neilsen, G., Rosen, P. F., Dickson, M. S., **Popovic, M.**, Schliesser, J., Hansen, L. D., Navrotsky, A., & Woodfield, B. F.* (2021). Heat capacities and thermodynamic functions of neodymia and samaria doped ceria. The Journal of Chemical Thermodynamics, 158, 106454. https://doi.org/10.1016/j.jct.2021.106454

Објављен је у часопису *Journal of Chemical Thermodynamics* који је индексиран као врхунски међународни часопис (М21). На раду има н = 8 аутора. Стога, нормиран број бодова је

К/(1+0.2(н-7)) = 8/(1+0.2(8-7)) = 6.67

Сви остали радови су са мање од 3 аутора за теоријске и мање од 7 аутора за експерименталне радове. Стога, на основу *Правилника о стицању истраживачких и научних звања* не подлежу нормирању на основу броја аутора.

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

Др Марко Поповић је током своје научне каријере показао висок степен самосталности у концептуализацији, припреми и остваривању истраживања на теоријском и експерименталном пољу. Степен самосталности може се видети по великом броју публикација где је једини аутор, као и по томе да је на већини радова аутор одговоран за коресподенцију.

Кандидат је такође руководио тимом који је радио хемијску и термодинамичку карактеризацију биомасе микроорганизама. Тим се састојао од истраживача из 4 лабораторије из две земље: Немачке и Велике Британије. Тим је радио на гајењу микроорганизама и припреми биомасе за анализу (Немачка), елементалној анализи (Немачка), *low temperature calorimetry* (Велика Британија) и анализи експерименталних података помоћу теоријских модела (Немачка). Др Марко Поповић је окупио и координисао истраживачки тим. Такође је координисао и његов рад у свим аспектима екперименталног и теоријског истраживања, прикупљањем, организовањем, анализом и публиковањем резултата истраживања [M22-1.19].

> **Popovic, M.*** Stenning, G. B., Göttlein, A., & Minceva, M. (2021). Elemental composition, heat capacity from 2 to 300 K and derived thermodynamic functions of 5 microorganism species. Journal of Biotechnology, 331, 99-107. https://doi.org/10.1016/j.jbiotec.2021.03.006

Др Марко Поповић је развио *atom counting* метод за одређивање хемијског састава вирусних честица, користећи генетске секвенце, секвенце протеина и морфологију вируса. Кандидат је самостално развио теоријску основу и написао компјутерски програм за ову методу. Рад је објављен у [M22-1.18]

> **Popovic, M.*** (2022). Atom counting method for determining elemental composition of viruses and its applications in biothermodynamics and environmental science. Computational Biology and Chemistry, 96, 107621. https://doi.org/10.1016/j.compbiolchem.2022.107621

Кандидат се бавио научним истраживањем у Европи и Сједињеним Америчким Државама (САД). У САД је завршио докторске студије на *Brigham Young University*, у периоду од септембра 2014 до августа 2018 године. У Европи је радио као постдокторски истраживач у Немачкој на *Technical University of Munich*, у периоду од јуна 2019 до октобра 2022. Кандидат је такође радио у Француској на *MINES ParisTech*, у периодима од јула 2012. до октобра 2012. и од јула 2013. до октобра 2013.

4.5. Допринос кандидата реализацији коауторских радова

У коауторским радовима наведеним у библиографији кандидат је дао велики допринос квалитету постигнутих научно истраживачких резултата који су их квалификовали за публиковање у међународним научним часописима и представљање на међународним научним конференцијама. Кандидат је активно учествовао у конципирању истраживања, реализацији, финалној обради и публиковању резултата. Од укупно 14 коауторских публикација у међународним научним часописима, кандидат је аутор одговоран за кореспоненцију на 8 а први аутор на 9.

4.6. Значај радова

Кандидат, др Марко Поповић, се бави истраживањем у области биотермодинамике и биоенергетике, које представљају иновативне мултидисциплинарне области, на пресеку хемије, биологије, физике и инжењерства. Ове области показују велики потенцијал у решавању најактуелнијих проблема човечанства, као што су разумевање интеракција између паразита и домаћина, одржива економија и заштита животне средине.

Др Марко Поповић бави се применом биотермодинамичке анализе на живу материју и интеракције међу организмима. Анализа живе материје укључује одређивање њеног елементалног састава и термодинамичких особина. Они се могу користити за анализу животних процеса, као што су раст, метаболизам и старење. Кандидат се такође бавио интеракцијама међу организмима, као што су вирус-домаћин интеракције и вирус-вирус интеракције.

Истраживање кандидата је такође било поменуто и у медијима. Његов чланак

> **Popovic, M.*** (2022). Omicron BA.2.75 subvariant of SARS-CoV-2 is expected to have the greatest infectivity compared with the competing BA.2 and BA.5, due to most negative Gibbs energy of binding. BioTech, 11(4), 45. https://doi.org/10.3390/biotech11040045

Приказан је на порталу за промоцију науке *News Medical.*

> Sidharthan, C. (2022). Increased Gibbs energy of binding indicates greater infectivity of SARS-CoV-2 BA.2.75. [Online] News Medical. Available at: https://www.news-medical.net/news/20221027/Increased-Gibbs-energy-of-binding-indicates-greater-infectivity-of-SARS-CoV-2-BA275.aspx (Accessed on November 19, 2022) (в. прилог под редним бројем 6.1)

Такође рад

> **Popovic, M.*** (2023). Never ending story? Evolution of SARS-CoV-2 monitored through Gibbs energies of biosynthesis and antigen-receptor binding of Omicron BQ.1, BQ.1.1, XBB and XBB.1 variants. Microbial Risk Analysis, 100250. https://doi.org/10.1016/j.mran.2023.100250

Приказан је на порталу за промоцију науке *CN-Healthcare*.

> Qianzhan Network (2023). The latest research: Different new coronavirus variant strains may have mixed infections! [Online] CN-Healthcare. Available at: https://www.cn-healthcare.com/articlewm/20230110/content-1496578.html (Accessed on January 15, 2023) (Translation of the original in Chinese: 前瞻网 (2023). 最新研究：不同新冠变异株毒株可能会出现混合感染现象！[Online] 健康界) (в. прилог под редним бројем 6.2)

VI. ИСПУЊЕНОСТ УСЛОВА ЗА СТИЦАЊЕ НАУЧНОГ ЗВАЊА ВИШИ НАУЧНИ САРАДНИК

За природно-математичке и медицинске науке

Диференцијални услов – од првог избора у претходно звање до избора у звање	Потребно је да кандидат има најмање XX поена, који треба да припадају следећим категоријама:		
		Неопходно	Остварено
Виши научни сарадник	Укупно	132	179.34
Обавезни (1)	M10+M20+M31+M32+M33+M41+M42+M90	100	176.34
Обавезни (2)	M11+M12+M21+M22+M23	72	175.34

VII. ЗАКЉУЧАК И ПРЕДЛОГ КОМИСИЈЕ

На основу увида у приложену документацију и разматрања постигнутих резултата у досадашњем научно–истраживачком раду, Комисија закључује да је кандидат, др Марко Поповић, Виши стручни сарадник Центра за електрохемију ИХТМ, остварио запажене резултате у научно-истраживачком и стручном раду. Кандидат је у последњих 10 година објавио 32 научна рада из категорије М20, од тога 1 рад у међународном часопису изузетне вредности М21а, 9 радова у врхунским међународним часописима М21, 15 радова у истакнутим међународним часописима М22, 7 радова у међународним часописима М23. Др Марко Поповић је такође објавио и 1 саопштење са међународног скупа штампано у целини М33, 2 саопштења са међународних скупова штампана у изводу М34 и 2 рада у националним часописима М53. Публиковани радови су цитирани 408 пута и *h-index* 13, према *Scopus* бази података (на дан 10.05.2023), односно 143 цитата и *h-index* 7 без аутоцитата (на дан 10.05.2023).

Висок степен самосталности кандидата у научно–истраживачком раду огледа се у томе да је од 32 научна рада у категорији М20, кандидат једини аутор на 18 радова. Такође, самосталност кандидата је додатно потврђена успешним руковођењем подпројектима у оквиру пројекта *SPREX-H2S* финансираног од стране *IFPEN*, на *Center of Thermodynamics of Processes*, *MINES ParisTech* (Француска). Од укупно 14 коауторских публикација у међународним научним часописима, кандидат је аутор одговоран за коресподенцију на 8 а први аутор на 9.

Поред научног доприноса, кандидат је учествовао у развијању, организацији и извођењу наставе на универзитетима у Европи и Сједињеним Америчким Државама и био ментор једног *Erasmus+* студента. Кандидат је остварио међународну сарадњу са истакнутим научницима из Европе, Сједињених Америчких Држава и Аустралије.

Кандидат је добитник седам домаћих и међународних награда и признања и одржао је два предавања по позиву. Члан је *Associate Editorial Board* међународног научног часописа *Frontiers in Plant Science* (M21a) и писао је рецензије за бројне научне радове.

Др Марко Поповић је развио *atom counting* метод за одређивање хемијског састава вирусних честица, који је цитиран и употребљиван и од стране других научника. Први је извршио хемијску и термодинамичку карактеризацију за бројне вирусе, бактерије, алге, гљиве, биљке и људска ткива. Такође први је описао хемијске реакције биосинтезе за ове организме.

У оквиру свог досадашњег ангажовања кандидат је показао да у потпуности влада методологијом и савременим истраживачким техникама, као и да самостално извршава задатке постављене у току истраживања. Кандидат показује иницијативу у руковођењу, као и постављању праваца и циљева нових истраживања.

Постигнути резултати указују да је др Марко Поповић у свом научно-истраживачком раду показао висок ниво самосталности и професионалности. На основу разматрања постигнутих резултата др Марка Поповића и увида у приложену документацију, Комисија констатује да др Марко Поповић испуњава све квалитативне и квантитативне услове потребне за избор у звање **Виши научни сарадник**, према *Закону о науци и истраживањима* („Службени гласник РС“, бр. 49/2019) и *Правилнику о стицању истраживачких и научних звања* („Службени гласник РС“, бр. 159/2020 и бр. 14/2023). Стога, Комисија предлаже Научном већу Универзитета у Београду - Института за хемију, технологију и металургију - Института од националног значаја за Републику Србију, да прихвати овај Извештај, као и предлог да др Марко Поповић буде изабран у звање **Виши научни сарадник,** и да га упути надлежним телима Министарства науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије у даљу процедуру.

У Београду
11.05.2023. године

КОМИСИЈА

Др Дејан Опсеница, научни саветник
Универзитет у Београду – Институт за хемију, технологију и металургију
Институт од националног значаја за Републику Србију
Председник Комисије

Др Матија Златар, научни саветник
Универзитет у Београду – Институт за хемију, технологију и металургију
Институт од националног значаја за Републику Србију
Члан Комисије

Др Иван Јуранић, редовни професор у пензији
Универзитет у Београду - Хемијски факултет
Члан Комисије