Назив института – факултета који подноси захтев:

Универзитет у Београду, Институт за Хемију, Технологију и Металургију – ИХТМ, Институт од националног значаја за Републику Србију, Центар за електрохемију, Његошева 12, 11000 Београд

РЕЗИМЕ ИЗВЕШТАЈА О КАНДИДАТУ ЗА СТИЦАЊЕ НАУЧНОГ ЗВАЊА

I. Општи подаци о кандидату

Име и презиме: Марко Поповић

Година рођења: 1990

ЈМБГ:

Назив институције у којој је кандидат стално запослен:

Универзитет у Београду, Институт за Хемију, Технологију и Металургију – ИХТМ, Институт од националног значаја за Републику Србију, Центар за електрохемију, Његошева 12, 11000 Београд

Дипломирао-ла:

2013. Хемијски Факултет Универзитета у Београду (в. прилог под редним бројем 1.1)

Мастерирао-ла::

2014 Факултет за Физичку Хемију Универзитета у Београду (в. прилог под редним бројем 1.2)

Докторирао-ла:

2018. Одељење за Хемију и Биохемију, Бригам Јанг Универзитет (*Department of Chemistry and Biochemistry, Brigham Young University*) (в. прилоге под редним бројем 1.3 и 1.4)

Постојеће звање: Виши стручни сарадник (в. прилог под редним бројем 1.5)

Научно звање које се тражи: Виши научни сарадник

Област науке у којој се тражи звање: Природно-математичке науке

Грана науке у којој се тражи звање: Хемија

Научна дисциплина у којој се тражи звање: Хемијска термодинамика

Назив научног матичног одбора којем се захтев упућује:

Матични научни одбор за хемију

II. Датум избора-реизбора у научно звање:

Научни сарадник: /

Виши научни сарадник: /

III. Научноистраживачки резултати (Прилог 1. и 2. правилника):

1. Монографије, монографске студије, тематски зборници, лексикографске и картографске публикације међународног значаја (уз доношење на увид) (М10):

	број	вредност	укупно
М11 =			
М12 =			
М13 =			
М14 =			
М15 =			
М16 =			
М17 =			
М18 =			

2. Радови објављени у научним часописима међународног значаја, научна критика; уређивање часописа (М20):

	број	вредност	укупно

M21a =	1	10	10
M21 =	7	8	56
M21 =	6.67	2	13.34
M22 =	15	5	75
M23 =	7	3	21
M24 =			
M25 =			
M26 =			
M27 =			
M28а =			
M28б =			
M29а =			
M29б =			
M29в =			

3. Зборници са међународних научних скупова (M30):

	број	вредност	укупно
M31 =			
M32 =			
M33 =	1	1	1
M34 =	2	2×0.5	1
M35 =			
M36 =			

4. Монографије националног значаја (M40):

	број	вредност	укупно
M41 =			
M42 =			
M43 =			

M44 =

M45 =

M46 =

M47 =

M48 =

M49 =

5. Радови у часописима националног значаја (M50):

	број	вредност	укупно
M51 =			
M52 =			
M53 =	2	2×1	2
M54 =			
M55 =			
M56 =			
M57 =			

6. Предавања по позиву на скуповима националног значаја (M60):

	број	вредност	укупно
M61 =			
M62 =			
M63 =			
M64 =			
M65 =			
M66 =			
M67 =			
M68 =			
M69 =			

7. Одбрањена докторска дисертација (M70):

	број	вредност	укупно

M70 =

8. Техничка решења (M80)

број вредност укупно

M81 =

M82 =

M83 =

M84 =

M85 =

M86 =

M87 =

9. Патенти (M90):

број вредност укупно

M91 =

M92 =

M93 =

M94 =

M95 =

M96 =

M97 =

M98 =

M99 =

10. Изведена дела, награде, студије, изложбе, жирирања и кустоски рад од међународног значаја (M100):

M101 =

M102=

M103=

M104 =

M105 =

M106 =

M107 =

11. Изведена дела, награде, студије, изложбе од националног значаја (M100):

M108 =

M109 =

M110 =

M111 =

M112 =

12. Документи припремљени у вези са креирањем и анализом јавних политика (M120):

M121 =

M122 =

M123 =

M124 =

IV. Квалитативна оцена научног доприноса (Прилог 1. Правилника):

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. Предавања су била под насловом

- *"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 рецензензирао радове за међународне научне часописе: *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. Студенти су обучени 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).

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 два чланка у међународним научним часописима *Acta Materialia* (ИФ 9.277, М21а, *Metallurgy & Metallurgical Engineering* 1/80) и *Journal of Chemical Thermodynamics* (ИФ 2.888, М21, *Thermodynamics* 14/61). (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).

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)

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*:

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 управљао 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

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

> 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", број 159 од 30. децембра 2020.): 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 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).

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)

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)

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*.

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 (M21a)
- 9 (девет) радова у врхунским међународним часописима (M21)
- 15 (петнаест) радова у истакнутим међународним часописима (M22)
- 7 (десет) радова у међународним часописима (M23)

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, M21a, *Chemistry, Multidisciplinary* 1/180), *Nature Catalysis* (ИФ 47.253, M21a, *Chemistry, Physical* 3/165), *Trends in Biotechnology* (ИФ 21.942, M21a, *Biotechnology & Applied Microbiology* 3/161), *Nature Communications* (ИФ 17.763, M21a, *Multidisciplinary Sciences* 6/74), *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* (ИФ 12.779, M21a, *Multidisciplinary Sciences* 7/74) и *Physical Review B* (ИФ 3.908, M21, *Physics, Applied* 41/160). Изабрани цитати су дати испод:

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, 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 има 2 експериментална рада у природно-математичким наукама са преко 7 аутора. Први рад је

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

> 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 испод 3 аутора за теоријске и испод 7 аутора за експерименталне радове. Стога не требају да се нормирају према већем броју 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 самосталан једини аутор, као и по томе да је на већини радова кореспондентни аутор.

Кандидат је такође управљао 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. Рађено је гајење микроорганизама и припрема биомасе за анализу (Немачка), елементална анализа (Немачка), *low temperature calorimetry* (Велика Британија) и анализа експерименталних података помоћу теоријских модела (Немачка). Др Марко Поповић је оформио истраживачки тим и кординисао његов рад у свим аспектима екпериментално и теоријског истраживања, прикупљањем, организовањем, анализом у публиковањем резултата истраживања.

> **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. *Atom counting* метод се имплементује помоћу компјутерског програма. Кандидат је смостално развио теоријску основу и направио компјутерски програм. Рад је објављем у соло чланку

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 на 2 континента: Европи и Сједињеним Америчким Државама (САД). У САД је завршио докторске студије на *Brigham Young University*, u периоду од септембра 2014 до августа 2018 године. У Европи је радио као *postdoc* 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 истражђивања, реализацији, финалној обради и публиковању резултата. Од укупно 15 коауторских публикација у међународним научним часописима, кандидат је кореспондентни аутор 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 биологије, хемије, 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)

Кратки прикази 5 најзначајнијих радова

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 чланку по први пут су пријављене хемијске формула и термодинамичке особине за 32 врсте микроорганизама, који укључују бактерије, гљиве и алге. Хемијски састави микроорганизама пријављени су у форми 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. 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*.

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 чланку развијен је *atom counting* метод за прорачун елементалног састава вируса на основу генетске секвенце, секвенци протеина и морфологије. *Atom counting* метод се имплементује помоћу компјутерског програма који је за ову сврху развијен. Програм очитава генетске секвенце и секвенце протеина, који предсвављају 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.

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 урађена је биоенергетска анализа еволуције варијанти SARS-CoV-2. Нађено је да су за биоенергетску карактеризацију еволуције вируса SARS-CoV-2 неопходно познавати две величине: Гибсову енергију антиген-рецептор везивања и Гибсову енергију биосинтезе. Гибсова енергија везивања је физичка *driving force* за везивање вируса за ћелију домаћина и улазак у ћелију домаћина. 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. Гибсова енергија биосинтезе је физичка *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)

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 овом раду су по први пут експериментално одређене хемијска формула и моларна ентропија 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 K, 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. Мој допринос укључује: развој идеје за истраживање, развијање медодологије, валидација резултата, формална анализи резултата, истраживање и писању 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*).

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

Овај рад бави се биотермодинамичким и биоенергетским разматрањем фотосинтезе и раста биљака. Жива материја биљака је прво хемијски описана помоћу 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 храњивих 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 из литературе. Гибсове енергије биосинтезе и фотосинтезе комбиноване су да се нађе Гибсова енергија раста - физичка *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.

V. Оцена Комисије о научном доприносу кандидата, са образложењем:

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 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 кандидат има *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 категорија 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).

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* (М21а) 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, 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**, у складу са Законом о науци и истраживању. 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**.

МИНИМАЛНИ КВАНТИТАТИВНИ ЗАХТЕВИ
ЗА СТИЦАЊЕ ПОЈЕДИНАЧНИХ НАУЧНИХ ЗВАЊА

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

Београд, 11.05.2023.

Председник комисије

Др Дејан Опсеница
научни саветник

Универзитет у Београду
Институт за Хемију, Технологију и Металургију
Институт од националног значаја за Републику Србију