

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

Научно веће Института за хемију, технологију и металургију нас је Одлуком бр. 1635/23.12.2024, донетом на електронској седници одржаној 23.12.2024. године, именовало за чланове Комисије за оцену испуњености услова и писање реферата за избор кандидата **др Светлане Јеремић**, научног сарадника и доцента Државног универзитета у Новом Пазару, у звање **виши научни сарадник**. На основу достављене документације о научноистраживачком раду кандидата, а у складу са Законом о науци и истраживањима („Службени гласник РС”, број 49/19) и Правилником о стицању истраживачких и научних звања Министарства науке, технолошког развоја и иновација ("Службени гласник РС", број 159/2020 и 14/2023) подносимо следећи

ИЗВЕШТАЈ

У складу са Правилником о стицању истраживачких и научних звања, Извештај обухвата:

- I. Биографске податке кандидата
- II. Комплетну библиографију кандидата, разврстану по категоријама, и груписану у листу А (радови публиковани након избора у звање научни сарадник) и листу Б (радови публиковани пре избора у звање научни сарадник), анализу радова, пет најзначајнијих референци за период од последњег избора у звање
- III. Квалитативну оцену научног доприноса кандидата
- IV. Табелу са квантитативном оценом научних резултата у погледу испуњености услова за стицање предложеног научног звања на основу коефицијената М
- V. Закључак Комисије о научном доприносу кандидата са образложењем и предлогом за одлучивање, упућен надлежном већу.

I БИОГРАФСКИ ПОДАЦИ

Др Светлана Јеремић (рођ. Милосављевић) је рођена 15.01.1981. године у Крагујевцу, где је завршила основну школу и Прву крагујевачку гимназију. Природно-математички факултет у Крагујевцу уписала је школске 2000/01. године. Дипломирала је на студијској групи Хемија 07.03.2006. године, чиме је стекла стручни назив Дипломирани хемичар за истраживање и развој, са средњом оценом током студија 9,28.

Дипломски рад под називом “Електронски садржај прстенова у свебензеноидним угљоводонцима“, рађен је под менторством проф. др Ивана Гутмана.

Докторске академске студије на Природно-математичком факултету у Крагујевцу кандидаткиња је уписала школске 2008/09. године и положила све предвиђене испите са просечном оценом 10. Докторску дисертацију под називом „Прилог познавању електронских особина полибензо-анелираних конјугованих молекула“, одбранила је на Природно-математичком факултету у Крагујевцу 25. јуна 2012. године. Израдом докторске дисертације руководио је академик и емеритус проф. др Иван Гутман.

Од 15.05.2010. године др Светлана Јеремић радила је као истраживач сарадник у Истраживачко-развојном центру за биоинжењеринг БиоИРЦ, у Крагујевцу. Од 01.10.2010. године запослена је на Државном универзитету у Новом Пазару, на Депарتمانу за хемијско-технолошке науке.

Светлана Јеремић изабрана је у звање асистента 02.09.2010. године на Државном универзитету у Новом Пазару. У звање асистента са докторатом изабрана је 03.07.2014. године. Први пут је у звање доцента изабрана 27.09.2017. године, а реизабрана је у звање доцента 14.05.2024. године. У научно звање научни сарадник у области природно-математичких наука – хемија, изабрана је одлуком Комисије за стицање научних звања на седници одржаној 27.06.2018. године, а на захтев поднет од стране Института за хемију, технологију и металургију Универзитета у Београду. На основу Решења о породилском одсуству у периоду од 01.01.2020. до 31.12.2021. године, изборни период др Светлане Јеремић продужен је до 27.06.2025. године.

Кандидаткиња је од момента ангажовања на Државном универзитету у Новом Пазару била ангажована у реализацији наставе на великом броју предмета како на основним тако и на мастер студијама. У оквиру свог педагошког ангажовања, Светлана Јеремић је у својству ментора руководила израдом седам одбрањених мастер радова, а у својству председника комисије учествовала у комисији за оцену и одбрану пет одбрањених мастер радова.

Светлана Јеремић је од 2011. до 2019. године била ангажована на реализацији пројектних задатака два национална пројекта, чиме је дала значајан допринос развоју домаће науке у области испитивања односа структуре и реактивности органских молекула применом комбинованих *in silico* метода.

Међународна сарадња Светлана Јеремић огледа се у реализацији досадашњих пројектних активности у оквиру три билатерална пројекта, једног TEMPUS и једног Erasmus+ пројекта. У својству руководиоца пројектног тима из Србије др Светлана Јеремић је конкурисала за суфинансирање билатералне научно-технолошке сарадње између Републике Србије и Републике Хрватске за период од 1. маја 2024. до 30. априла 2026. године. Захтев за суфинансирање наведене билатералне сарадње је тренутно у процесу евалуације.

Светлана Јеремић је у периоду 31.05.2022-31.05.2023. била члан Друштва за електронику, телекомуникацију, рачунарство, аутоматику и нуклеарну технику ЕТРАН. Члан је Српског хемијског друштва и председник наставне секције подружнице Нови Пазар. Кандидаткиња је 2023. године била члан међународног организационог одбора Друге међународне конференције за хемо и биоинформатику (2nd International Conference on Chemo and BioInformatics, 28th – 29th September 2023, Kragujevac, Serbia). Гостујући је уредник специјалног броја "Mechanisms of Organic Reactions" чији је издавач Open Access Journal by MDPI. Рецензирала је преко 20 научних радова у преко 10 различитих међународних и истакнутих међународних часописа, а у својству члана комисије за оцену рукописа учествовала је у рецензији уџбеника „Увод у хемометрију“ аутора др Бориса Фуртуле, редовног професора Природно-математичког факултета

Универзитета у Крагујевцу.

Светлана Јерemiћ је до сада објавила 33 научна рада у познатим часописима међународног значаја категорија М20, 1 поглавље у тематском зборнику водећег међународног значаја (М13), 1 научни рад у часопису националног значаја (М53), и велики број конференцијских саопштења на националним и међународним конференцијама.

На основу базе Scopus (дана 09.12.2024.г) научни радови др Светлане Јерemiћ су цитирани 522 пута (475 без аутоцитата, и 342 без аутоцитата свих коаутора). Хиршов индекс (*h*) кандидата износи 12 (без аутоцитата свих коаутора). Говори енглески језик.

Истраживања у којима је кандидаткиња учествовала могу се по тематици и методологији сврстати у неколико група. Најранија истраживања др Светлане Јерemiћ (рођ. Милосављевић), спроведена у оквиру израде докторске дисертације, бавила су се применом хемијске теорије графова у циљу испитивања електронског и енергетског садржаја прстенова у полибензеноидним угљоводоницима, а у зависности од начина анелације и броја анелираних прстенова. Током израде докторске дисертације, а интензивно након њене одбране, Светлана Јерemiћ почела је да се бави применом теорије функционала густине у циљу испитивања кинетичких и термодинамичких показатеља механизма антиоксидативне и антирадикалске активности природних и синтетичких полифенолних једињења. Тренутна истраживања кандидаткиње заснивају се на израчунавању кинетичких и термодинамичких параметара као показатеља антирадикалског и антиоксидативног капацитета једињења применом DFT метода. Потенцијал испитиваних молекула да инхибирају одређене протеине од значаја за развој неких болести у људском организму, или за развој патогених микроорганизама, процењује се применом *in silico* симулација молекулског докинга и молекулске динамике. За једињења чији термодинамички и кинетички параметри указују на висок капацитет антиоксидативне и антирадикалске активности једињења, а методе молекулског докинга и молекулске динамике на висок инхибиторски потенцијал, даље се одређују параметри који указују на могућност апсорпције, дистрибуције, метаболизма и излучивања испитиваног једињења, као и његове токсичности (ADMET анализа). На овај начин др Светлана Јерemiћ се у оквиру свог научног рада бави проценом могућности употребе одабраних природних или синтетичких једињења у медицини и фармацији.

II БИБЛИОГРАФИЈА РАДОВА

Сви научни радови, поглавља и конференцијска саопштења др Светлане Јерemiћ која подлежу оцењивању за избор у звање виши научни сарадник се налазе на листи А, и публиковани су након Одлуке о спровођењу поступка за избор у научно звање научни сарадник Научног одбора Универзитета у Београду Научне установе Институт за хемију, технологију и металургију од 08.09.2017. године, број 1195/08.09.2017. Листа Б представља научне резултате пре претходног избора у звање. Навођен је број хетероцитата научних радова доступан у Scopus бази на дан 09.12.2024. године.

Светлана Јерemiћ, научни сарадник

ORCID број: 0000-0001-5571-6880

ИБИ (Идентификациони Број Истраживача) **AO159**

Scopus ID: <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=12042011100>

(A) Радови публиковани након претходног избора у звање научни сарадник

1. Монографска студија/поглавље у књизи M11 или рад у тематском зборнику водећег међународног значаја (M13 = 7)

Од претходног избора:
(M13_(нормирано) = 1×7 = 7)

1.1. S. Jeremić, Z. Marković, Free Radical Scavenger Activity and P-glycoprotein Inhibition Capacity of 1,2,4-Trihydroxyxanthone, *Computational Bioengineering and Bioinformatics. ICCB 2019., Learning and Analytics in Intelligent Systems*, vol 11. Springer, Cham, **2020**, 92–103. DOI: 10.1007/978-3-030-43658-2_9

ISBN: 978-3-0346-0479-6
https://doi.org/10.1007/978-3-030-43658-2_9
Цитираност (без аутоцитата): 0
Број аутора: 2
Тип рада: нумеричке симулације
Број поена = 7

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

Од претходног избора: M20 = 52,35 Од претходног избора ИФ = 35,562

Радови у истакнутом међународном часопису (M21 = 8)
(M21_(укупно) = 2×8 = 16)
(M21_(нормирано) = 2×8 = 16)

2.1. Z. Marković, A. V. Komolkin, A. V. Egorov, D. Milenković, **S. Jeremić**, Alizarin as a potential protector of proteins against damage caused by hydroperoxyl radical, *Chemico-Biological Interactions*, **2023**, 373, 110395.
<https://doi.org/10.1016/j.cbi.2023.110395>

ИФ: 5.100 (2022)
Категорија: Биохемија и молекуларна биологија (78/285)
Цитираност (без аутоцитата): 2
Број аутора: 5
Тип рада: нумеричке симулације
Број поена = 8

2.2. S. Jeremić, A. Amić, M. Stanojević-Pirković, Z. Marković, Selected anthraquinones as potential free radical scavengers and P-glycoprotein inhibitors, *Organic and Biomolecular Chemistry*, **2018**, 16 (11), 1890–1902.
<https://doi.org/10.1039/C8OB00060C>

ИФ: 3.564 (2016)
Категорија: Хемија, Органска хемија (14/59)
Цитираност (без аутоцитата): 25

Број аутора: 4
Тип рада: нумеричка симулација
Број поена = 8

Радови у истакнутом међународном часопису (M22 = 5)

(M22_(укупно)) = 6×5 = 30)

(M22_(нормирано)) = 2×5 + 3×3,57 + 1×2,50 = 23,21)

2.3. Ž. Milanović, **S. Jeremić**, M. Antonijević, D. Dimić, Đ. Nakarada, E. Avdović, Z. Marković, The inhibitory potential of 4,7-dihydroxycoumarin derivatives on ROS-producing enzymes and direct HOO•/O₂^{•-} radical scavenging activity – a comprehensive kinetic DFT study, *Free Radical Research*, **2024**, 58 (8-9), 493–508.

<https://doi.org/10.1080/10715762.2024.2400674>

ИФ: 4.288 (2021)

Категорија: Биохемија и Молекуларна биологија (146/297)

Цитираност (без аутоцитата): 0

Број аутора: 7

Тип рада: нумеричке симулације

Број поена = 3,57

2.4. M. S. Dekić, A. M. Gusinac, **S. R. Jeremić**, V. D. Jakovljević, S. A. Plojović, D. Jovanović, N. S. Radulović, Abietane diterpenoid salvipisone: structure elucidation, conformational analysis, and antimicrobial activity, *Journal of Molecular Structure*, **2024**, 1321 (1), 139807. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2024.139807>

ИФ: 4.000 (2023)

Категорија: Хемија, Физичка хемија (65/161)

Цитираност (без аутоцитата): 0

Број аутора: 7

Тип рада: нумеричке симулације

Број поена = 3,57

2.5. N. Janković, **S. Jeremić**, J. Matić, E. Milović, M. Kosanić, Investigation of the antimicrobial potential of selected pyrido-dipyrimidines: A computational approach to Gyrase inhibition, *Journal of Molecular Structure*, **2024**, 1315, 138940.

<https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2024.138940>

ИФ: 4.000 (2023)

Категорија: Хемија, Физичка хемија (65/161)

Цитираност (без аутоцитата): 0

Број аутора: 5

Тип рада: нумеричке симулације

Број поена = 5

2.6. A. Kesić, **S. Jeremić**, B. Petrović, Experimental and theoretical studies of the substitution reactions of some bifunctional Au(III) complexes with biologically relevant thiols and thioethers, *Journal of Coordination Chemistry*, **2024**, 77 (7-8), 653–669.

<https://doi.org/10.1080/00958972.2023.2296382>

ИФ: 2.200 (2023)

Категорија: Хемија, Неорганска и нуклеарна хемија (22/42)

Цитираност (без аутоцитата): 1

Број аутора: 3

Тип рада: нумеричке симулације

Број поена = 5

2.7. N. Janković, J. Tadić, E. Milović, Z. Marković, **S. Jeremić**, J. Petronijević, N. Joksimović, T. Teodora Borović, S. Nasir, A. Bukhari, Investigation of the radical scavenging potential of vanillin-based pyrido-dipyrimidines: experimental and in silico approach, *RSC Advances*, **2023**, *13*, 15236–15242. <https://doi.org/10.1039/D3RA02469E>

ИФ: 4.036 (2021)

Категорија: Хемија, Мултидисциплинарност (75/180)

Цитираност (без аутоцитата): 2

Број аутора: 10

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 2,5

2.8. T. C. Ngo, T. V-T Mai, T. T. Pham, **S. Jeremić**, Z. Marković, H. K. Lam, D. Q. Dao, Natural acridones and coumarins as free radical scavengers: Mechanistic and kinetic studies, *Chemical Physics Letters*, **2020**, *746*, 137312. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2020.137312>

ИФ: 2.328 (2020)

Категорија: Хемија, Физичка хемија (115/162)

Цитираност (без аутоцитата): 8

Број аутора: 7

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 3,57

Радови у међународном часопису (M23 = 3)

(M23_(укупно) = 5×3 = 15)

(M23_(нормирано) = 2×3 + 2×2,50 + 1×2,14 = 13,14)

2.9. **S. Jeremić**, E. Avdović, Z. Dolićanin, R. Vojinović, M. Antonijević, Z. Marković, In silico study of novel coumarin derivatives as potential agents in the pancreatic cancer treatment, *Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering*, **2024**, Accepted 13 Nov 2024, Published online: 20 Nov 2024, 1–15. <https://doi.org/10.1080/10255842.2024.2431345>

ИФ: 1.700 (2023)

Категорија: Инжењеринг, Биомедицина (75/98)

Цитираност (без аутоцитата): 0

Број аутора: 6

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 2,5

2.10. D. Milenković, J. M. Dimitrić Marković, D. Dimić, **S. Jeremić**, D. Amić, M. Stanojević Pirković, Z. S. Marković, Structural characterization of kaempferol: a spectroscopic and computational study, *Macedonian Journal of Chemistry and Chemical Engineering*, **2019**, 38 (1) 49–62.

<https://doi.org/10.20450/mjccce.2019.1333>

ИФ: 0.829 (2019)

Категорија: Хемија, Мултидисциплинарност (150/177)

Цитираност (без аутоцитата): 16

Број аутора: 7

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 2,14

2.11. **S. Jeremić**, T. H. Tran, Z. Marković, C. T. Ngo, D. Q. Dao, Insight into interaction properties between mercury and lead cations with chitosan and chitin: density functional theory studies, *Computational and Theoretical Chemistry*, **2018**, 1138, 99–106.

<https://doi.org/10.1016/j.comptc.2018.06.010>

ИФ: 1.549 (2016)

Категорија: Хемија, Физичка хемија (101/146)

Цитираност (без аутоцитата): 13

Број аутора: 5

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 3

2.12. E. Selimović, **S. Jeremić**, B. Ličina, T. Soldatović, Kinetics, DFT Study and Antibacterial Activity of Zinc(II) and Copper(II) Terpyridine Complexes, *Journal of the Mexican Chemical Society*, **2018**, 62 (1), 1–18. <https://doi.org/10.29356/jmcs.v62i1.576>

ИФ: 0.710 (2016)

Категорија: Хемија, Мултидисциплинарност (134/166)

Цитираност (без аутоцитата): 11

Број аутора: 4

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 3

2.13. Z. Marković, M. Filipović, N. Manojlović, A. Amić, **S. Jeremić**, D. Milenković, QSAR of the free radical scavenging potency of selected hydroxyanthraquinones, *Chemical Papers*, **2018**, 72 (11), 2785–2793. <https://doi.org/10.1007/s11696-018-0534-3>

ИФ: 1.258 (2016)

Категорија: Хемија, Мултидисциплинарност (110/166)

Цитираност (без аутоцитата): 9

Број аутора: 6

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 2,5

3. Зборници међународних научних скупова (M30)

Од претходног избора: M30 = 16,59

Саопштење са међународног скупа штампано у целини (M33 = 1)

(M33_(укупно)) = 9×1 = 9)

(M33_(нормирано)) = 8×1 + 1×0,83 = 8,83)

3.1. S. Jeremić, M. Dekić, V. Jakovljević, E. Selimović, A. Gusinac, Inhibitory potential of barbarin and its platinum(II) complex towards PBP1a protein, 2nd International Conference on Chemo and BioInformatics, 28th – 29th September **2023**, Kragujevac, Serbia, str. 617-620. ISBN 978-86-82172-02-4; COBISS.SR-ID 125908489.

https://drive.google.com/file/d/1-uYhI7U2z7btGW9pfSGaXt9_0_5vyQEm/view

Број аутора: 5

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 1

3.2. S. Jeremić, N. Janković, J. Đorović Jovanović, Z. Marković, The assessment of the antioxidant capacity of the selected vanillin based pyrido-dipyrimidines using DPPH assay: in silico approach, 2nd International Conference on Chemo and BioInformatics, 28th – 29th September **2023**, Kragujevac, Serbia, str. 613-616. ISBN: 978-86-82172-02-4; COBISS.SR-ID 125908489.

https://drive.google.com/file/d/1-uYhI7U2z7btGW9pfSGaXt9_0_5vyQEm/view

Број аутора: 4

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 1

3.3. S. Jeremić, E. Selimović, M. Dekić, T. Soldatović, Inhibition Potency of Terpyridine Metal Complexes toward Penicillin-Binding Protein 1A, 9th IcETran Conference 2022, 6th - 9th June **2022**, Novi Pazar, Republic of Serbia, str. 1-4. ISBN: 978-86-7466-930-3; COBISS.SR-ID 71309321.

Број аутора: 4

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 1

https://www.etransr.rs/2022/zbornik/CD-ZBORNIC_ETRAN_22.pdf

3.4. A. Kesić, S. Jeremić, J. Đorović Jovanović, Z. Marković, Anthraruflin as reverse transcriptase (RT) inhibitor and potential inhibitor of HIV replication, 1th International Conference „Conference On Advances in Science and Technology“ COAST 2022, 26th - 29th May **2022**, Herceg Novi, Montenegro, str. 399-405. ISBN: 978-9940-611-04-0; COBISS.CG-ID 23232772.

<https://scidar.kg.ac.rs/bitstream/123456789/19274/1/1%20Rad%20COAST%202022.pdf>

Број аутора: 4

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 1

3.5. S. R. Jeremić, M. S. Stanojević Pirković, J. R. Đorović Jovanović, Z. S. Marković, Free radical scavenger capacity of 1,2,5- trihydroxyanthraquinone and 1,2,5- trihydroxythioxanthone: a theoretical comparative study, The 21st IEEE International Conference on BioInformatics and BioEngineering (BIBE2021), 25th - 27th October **2021**,

Kragujevac, Serbia, str. 1-4. DOI: 10.1109/BIBE52308.2021.9635259

<https://ieeexplore.ieee.org/document/9635259>

Број аутора: 4

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 1

3.6. J. R. Đorović Jovanović, D. S. Dimić, M. S. Stanojević Pirković, **S. R. Jeremić**, D. A. Milenković, Molecular docking analyses of some cyclohexadiene derivatives, 1st International Conference on Chemo and Bioinformatics (ICCB 2021), 26th - 27th October **2021**, Kragujevac, Serbia, str. 423-426. DOI:10.46793/ICCB21.423DJ

<https://drive.google.com/file/d/1QVvLrSrtxfmLOmdVMjM4IN1b81UIiPNg/view>

Број аутора: 5

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 1

3.7. **S. R. Jeremić**, J. R. Đorović Jovanović, M. S. Stanojević Pirković, Z. S. Marković, Thermodynamically investigations of free radical scavenger potency of 1,2,4-trihydroxythioxanthone, 1st International Conference on Chemo and Bioinformatics (ICCB 2021), 26th - 27th October **2021**, Kragujevac, Serbia, str. 414-417. ISBN 978-86-81037-75-1; COBISS.SR-ID 48894473.

<http://iccbikg.kg.ac.rs/wp-content/uploads/2021/11/ICCBIKG2021-Proceedings-EIIVers.pdf>

Број аутора: 4

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 1

3.8. J. Đorović, **S. Jeremić**, N. Manojlović, D. Milenković, Z. Marković, Antioxidative capacity of evernic acid and its interactions with TDP1, 19th International Conference on Bioinformatics and Bioengineering (IEEE BIBE 2019), 28th - 30th October **2019**, Athena, Greece, str. 56-59. ISBN: 978-1-7281-4617-1.

<https://www.computer.org/csdl/proceedings-article/bibe/2019/461700a056/1grPdJ9Qc7e>

Број аутора: 5

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 1

3.9. Z. Marković, J. Đorović, D. Milenković, **S. Jeremić**, Lj. Joksović, A. Amić; Antiradical activity of selected triazole compounds, 14th International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry, 24th - 28th September **2018**, Belgrade, Serbia, str. 121-124. ISBN: 978-86-82475-36-1; COBISS.SR-ID 267528204.

<https://www.socphyschemserb.org/media/publications/physical-chemistry-2018-vol1.pdf>

Број аутора: 6

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 0,83

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

(M34_(укупно) = 16 × 0,5 = 8)

(M34_(нормирано) = 13 × 0,5 + 3 × 0,42 = 7,76)

3.10. S. A. Plojović, **S. R. Jeremić**, V. D. Jakovljević, A. M. Gusinac, N. S. Radulović,

M. S. Dekić, *In silico* and *in vitro* investigation of the antimicrobial activity of salvipisone. 60th Meeting of the Serbian Chemical Society, 8th – 9th June 2024, Niš, Serbia, str. 36. ISBN: 978-86-7132-086-3.

Број аутора: 6

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 0,42

3.11. A. M. Gusinac, M. S. Dekić, **S. R. Jeremić**, S. A. Plojović, N. S. Radulović, Conformational analysis of salvipisone on the basis of ¹H NMR higher-order spin-spin interactions. 60th Meeting of the Serbian Chemical Society, 8th – 9th June 2024, Niš, Serbia, str. 112. ISBN: 978-86-7132-086-3.

Број аутора: 5

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 0,5

3.12. **S. Jeremić**, A. Kesić, J. Đorović Jovanović, B. Petrović, Substituted bifunctional Au(III)-2,2'-bipyridine complexes as potential PARP inhibitors, 9th International Electronic Conference on Medicinal Chemistry (ECMC 2023), 1st - 30th November 2023, online. <https://sciforum.net/paper/view/15778>

Број аутора: 4

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 0,5

3.13. E. S. Selimović, **S. R. Jeremić**, New technologies in chemistry teaching – yes or no? Challenges and advantages, International Scientific Conference: Education during COVID-19 pandemic: Experience and lessons learned, 1st - 3th June 2023, University of Belgrade, Teacher Education Faculty, str. 248-249. ISBN: 978-86-7849-319-5; COBISS.SR-ID 116841993.

Број аутора: 2

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 0,5

3.14 **S. Jeremić**, A. Kesić, J. Đorović Jovanović, Z. Marković, Anthrarrufin and its anionic moieties as potential inhibitors of HIV-1 reverse transcriptase (RT). 8th International Electronic Conference on Medicinal Chemistry (ECMC 2022), 1st -30th November 2022, online. <https://sciforum.net/paper/view/13502>

Број аутора: 4

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 0,5

3.15. J. Đorović Jovanović, **S. Jeremić**, Z. Marković, Inhibitory Potency of usnic acid toward phosphodiesterase type 5. 1st International Conference on Mathematical Modelling in Mechanics and Engineering, Mathematical Institute SANU, 8th – 10th September 2022, Belgrade, Serbia, str. 39. ISBN: 978-86-6060-127-0; COBISS.SR-ID 72444681.

<https://www.mi.sanu.ac.rs/~icme/icme2022/>

https://www.mi.sanu.ac.rs/~icme/icme2022/Program_Final.pdf

Број аутора: 3

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 0,5

3.16. S. Jeremić, J. Đorović Jovanović, Z. Marković, Inhibition Potency of 1,2,4-trihydroxyanthraquinone and 1,2,4-trihydroxyxanthone toward penicillin-binding proteins 1A. 1st International Conference on Mathematical Modelling in Mechanics and Engineering, Mathematical Institute SANU, 8th – 10th September 2022, Belgrade, Serbia, str. 53. ISBN: 978-86-6060-127-0; COBISS.SR-ID 72444681.

<https://www.mi.sanu.ac.rs/~icme/icme2022/>

https://www.mi.sanu.ac.rs/~icme/icme2022/Program_Final.pdf

Број аутора: 3

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 0,5

3.17. Z. Marković, J. Đorović, N. Manojlović, M. Stanojević-Pirković, S. Jeremić, Antioxidative properties of usnic acid and its interaction with tyrosyl-DNA phosphodiesterase 1, 8th International Conference on Computational Bioengineering, 4th – 6th September 2019, Belgrade, Serbia, str. 76. ISBN: 978-86-81037-75-1 (UK); COBISS.SR-ID 278926348.

<http://www.iccb2019.kg.ac.rs/index.php/proceedings>

Број аутора: 5

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 0,5

3.18. Z. S. Marković, E. H. Avdović, Ž. B. Milanović, D. Milenković, S. Jeremić, S. R. Trifunović, Vibrational spectroscopy study of coumarine-derived ligand 3-(1-(o-toluidino)ethylidene)-chroman-2,4-dione: A combined theoretical and experimental investigation, 8th International Conference on Computational Bioengineering, 4th – 6th September 2019, Belgrade, Serbia, str. 84-85. ISBN: 978-86-81037-75-1 (UK); COBISS.SR-ID 278926348.

<http://www.iccb2019.kg.ac.rs/index.php/proceedings>

Број аутора: 6

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 0,42

3.19. Z. Marković, S. Šemović, Ž. Milanović, A. Amić, S. Jeremić, Scavenger capacity of the 1,2,4-trihydroxyxanthone toward hydroxyl, hydroperoxyl and methylperoxyl radicals, 8th International Conference on Computational Bioengineering, 4th – 6th September 2019, Belgrade, Serbia, str. 86. ISBN: 978-86-81037-75-1 (UK); COBISS.SR-ID 278926348.

<http://www.iccb2019.kg.ac.rs/index.php/proceedings>

Број аутора: 5

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 0,5

3.20. S. Jeremić, A. Amić, M. Stanojević Pirković, Z. Marković, Anthraquinones as potential free radical scavengers and P-glycoprotein inhibitors, 11th Joint Meeting on Medicinal Chemistry 2019, 27th – 30th June 2019, Prague, Czech Republic, str. 31. ISBN: 978-80-907442-0-2

<https://www.cfs-cls.cz/Sections/Section-of-Synthetic-Drugs/JMMC2019/>

Број аутора: 4

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 0,5

3.21. J. R. Đorović, **S. R. Jeremić**, Z. S. Marković, D. Dimić, M. Stanojević-Pirković, Assessment the potential of 1,2,4-trihydroxyanthone to inhibit P-glycoprotein, 7th International Congress of Serbian Society of Mechanics, 24th – 26th June **2019**, Sremski Karlovci, Serbia, str. 1-2. ISBN: 978-86-909973-7-4 ; COBISS.SR-ID 277232652.

http://www.ssm.kg.ac.rs/archive/congress_2019/topics.html

http://www.ssm.kg.ac.rs/archive/congress_2019/pdf/Technical_programme_2019.pdf

Број аутора: 5

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 0,5

3.22. Ž. B. Milanović, E. H. Avdović, S. R. Trifunović, **S. R. Jeremić**, Z. S. Marković, Investigation interaction between a palladium (II) complexes with a coumarin ligands and Substance P-receptor, 7th International Congress of Serbian Society of Mechanics, 24th – 26th June **2019**, Sremski Karlovci, Serbia, str. 1-2. ISBN: 978-86-909973-7-4 ; COBISS.SR-ID 277232652

http://www.ssm.kg.ac.rs/archive/congress_2019/topics.html

http://www.ssm.kg.ac.rs/archive/congress_2019/pdf/Technical_programme_2019.pdf

Број аутора: 5

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 0,5

3.23. A. Amić, Z. Marković, J. M. Dimitrić Marković, J. Đorović, **S. Jeremić**, D. Milenković, The role of catechol moiety in free radical scavenging by simple hydroxybenzoic acids, XII Savjetovanje hemičara, tehnologa i ekologa Republike Srpske, 2nd – 3th November **2018**, Teslić, Republika Srpska, str. 24. ISBN: 978-99938-54-72-2; COBISS.SR-ID 7759640.

Број аутора: 6

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 0,42

3.24. Ž. Milanović, J. Đorović, Z. Marković, A. Amić, **S. Jeremić**, Inactivation of free radical species with selected triazoles, Belgrade BioInformatics Conference 2018 (BELBI2018), 18th – 22th June **2018**, Belgrade, Serbia, str. 120.

<https://belbi.bg.ac.rs/wp-content/uploads/2018/07/Book-of-abstracts-Belbi2018.pdf>

Број аутора: 5

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 0,5

3.25. A. Amić, **S. Jeremić**, B. Lučić, Z. Marković, D. Amić, QSAR of radical inactivation by selected anthraquinones, 30th Mathematics, Chemistry and Computer Science Conference, 30th MC2 Conference Math/Chem/Comp 2018, 18th – 23th June **2018**, Dubrovnik, Croatia, str. 1.

https://www.pmf.unizg.hr/images/50010461/MC2_2018_Book_of_Abstracts.pdf

Број аутора: 5

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 0,5

4. Зборници националних научних скупова (M60)

Од претходног избора: M60 = 4,56

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

(M63_(укупно)) = 5×1 = 5)

(M63_(нормирано)) = 2×1 + 2×0,71 + 1×0,62 = 4,04)

4.1. Ž. Milanović, M. Antonijević, **S. Jeremić**, J. Đorović Jovanović, D. Milenković. Napredni procesi oksidacije hlorfenolnih jedinjenja iz otpadnih voda – kinetička DFT studija. XXVII Savetovanje o biotehnologiji, 25-26. mart, 2022. Čačak Zbornik radova, str. 321-326. DOI: 10.46793/SBT27.321M

<https://drive.google.com/file/d/1qFcnR22ZchsS4gEPw7CKJtxXwQ5zR02r/view>

Број аутора: 5

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 1

4.2. Z. Marković, **S. Jeremić**, Dž. Ferizović, A. Amić, J. Đorović, Ispitivanje mehanizama antioksidativne aktivnosti maltola sa hidroksilnim radikalom, XXIV Savetovanje o biotehnologiji, 15-16. mart, 2019. Čačak, Zbornik radova 2, str. 821-826. ISBN 978-86-87611-68-9 (Vol. 1); ISBN 978-86-87611-69-6 (Vol. 2); COBISS.SR-ID 274576652.

https://afc.edu.rs/files/data/sb/zbornik/Zbornik_radova_2_-_SB2019.pdf

Број аутора: 5

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 1

4.3. Z. Marković, E. Avdović, D. Milenković, D. Dimić, **S. Jeremić**, J. Đorović, Ž. Milanović, Ispitivanje protein-ligand interakcija humane tirozil-DNK fosfodiesteraze 1 i 3-(1-(2-hidroksifenil)amino)etiliden) hroman-2,4-diona, XXIV Savetovanje o biotehnologiji, 15-16. mart, 2019. Čačak, Zbornik radova 2, str. 815-820. ISBN 978-86-87611-68-9 (Vol. 1); ISBN 978-86-87611-69-6 (Vol. 2); COBISS.SR-ID 274576652.

https://afc.edu.rs/files/data/sb/zbornik/Zbornik_radova_2_-_SB2019.pdf

Број аутора: 7

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 0,71

4.4. E. Avdović, D. Milenković, **S. Jeremić**, J. Đorović, N. Vuković, Z. Dolićanin, S. Trifunović, Z. Marković, Ligand-protein interakcije 3-(1-(3-hidroksipropilamino)etiliden)hroman-2,4-diona sa humanim C reaktivnim proteinom, XXIII Savetovanje o biotehnologiji, 9-10. mart 2018. Čačak, Zbornik radova, str. 403-408. ISBN 978-86-87611-55-9; COBISS.SR-ID 258772236.

https://afc.edu.rs/files/data/sb/zbornik/Zbornik_radova_SB2018.pdf

Број аутора: 8

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 0,62

4.5. E. Avdović, **S. Jeremić**, A. Amić, M. Pirković, D. Milenković, J. Đorović, Z. Marković, Antioksidativna i inhibitorska aktivnost alizarin-2-glikozida, XXIII Savetovanje o biotehnologiji, 9-10. mart 2018. Čačak, Zbornik radova, str. 409-414. ISBN

978-86-87611-55-9; COBISS.SR-ID 258772236.

https://afc.edu.rs/files/data/sb/zbornik/Zbornik_radova_SB2018.pdf

Број аутора: 7

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 0,71

Радови саопштени на скупу националног значаја, штампани у изводу (M64 = 0,2)

(M64_(укупно) = 3×0,2 = 0,6)

(M64_(нормирано) = 2×0,2 + 1×0,12 = 0,52)

4.6. E. Selimović, S. Pantović, **S. Jeremić**, Upotreba informaciono-komunikacionih tehnologija (IKT) i alata na časovima hemije. Aprilski dani o nastavi hemije, Univerzitet u Beogradu, Hemijski fakultet, 24-25. april **2024.**, str. 19.

Број аутора: 3

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 0,2

4.7. A. Amić, D. Milenković, J. Đorović, **S. Jeremić**, E. Avdović, Z. Marković, J. Dimitrić Marković, D. Amić, Oksidativni stres – endogena i egzogena zaštita, Drugi kongres biologa Srbije, Kladovo, Srbija, 25-30. septembar **2018.** str.266. ISBN 978-86-81413-08-1; COBISS.SR-ID 267655948.

<https://www.serbiosoc.org.rs/wp-content/uploads/2018/11/DRUGI-KONGRES-BIOLOGA-SRBIJE-knjiga-sazetaka.pdf>

Број аутора: 8

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 0,12

4.8. M. Antonijević, **S. Jeremić**, Z. Marković, Termodinamičko ispitivanje antioksidativnih mehanizama 7-hidroksikumarina, Drugi kongres biologa Srbije, Kladovo, Srbija, 25-30. septembar **2018.** str.35. ISBN 978-86-81413-08-1; COBISS.SR-ID 267655948.

<https://www.serbiosoc.org.rs/wp-content/uploads/2018/11/DRUGI-KONGRES-BIOLOGA-SRBIJE-knjiga-sazetaka.pdf>

Број аутора: 3

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 0,2

**Укупно од избора: M = M13 + M21 + M22 + M23 + M33 + M34 + M63 + M64 =
7 + 16 + 23,21 + 13,14 + 8,83 + 7,76 + 4,04 + 0,52 = 80,50**

Укупан ИФ од избора: 35,562

(Б) Радови публиковани пре избора у звање научни сарадник

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

Укупно: M20 = 79,84 Укупно ИФ = 26,514

Радови у истакнутом међународном часопису (M21 = 8)

(M21_(укупно)) = 2×8 = 16)

(M21_(нормирано)) = 2×8 = 16)

- 1.1. S. Marković, **S. Jeremić**, J. Đurđević, I. Gutman, Triplet fluoranthenes: Aromaticity versus unpaired electrons, *Journal of Molecular Modeling*, **2011**, 17 (4) 805–810.
<http://link.springer.com/article/10.1007/s00894-010-0778-5>

ИФ: 2.336 (2009)

Категорија: Хемија, Мултидисциплинарност (38/140)

Цитираност (без аутоцитата): 16

Број аутора: 4

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 8

- 1.2. A. T. Balaban, J. Đurđević, I. Gutman, **S. Jeremić**, S. Radenković, Correlations between Local Aromaticity Indices of Bipartite Conjugated Hydrocarbons, *Journal of Physical Chemistry. Part A*, **2010**, 114 (18) 5870–5877.
<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp1002148>

ИФ: 2.899 (2009)

Категорија: Физика, Атомска, Молекуларна и општа хемија (8/33)

Цитираност (без аутоцитата): 10

Број аутора: 5

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 8

Радови у истакнутом међународном часопису (M22 = 5)

(M22_(укупно)) = 6×5 = 30)

(M22_(нормирано)) = 4×5 + 2×4,17 = 28,34)

- 1.3. D. Milenković, J. Đorović, **S. Jeremić**, J. M. Dimitrić Marković, E. H. Avdović, Z. Marković, Free radical scavenging potency of dihydroxybenzoic acids, *Journal of Chemistry*, **2017**, 2017, 5936239, 1–9.
<https://doi.org/10.1155/2017/5936239>

ИФ: 1.726 (2017)

Категорија: Хемија, Мултидисциплинарност (97/171)

Цитираност (без аутоцитата): 27

Број аутора: 6

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 4,17

- 1.4. S. Jeremić**, S. Radenković, M. Filipović, M. Antić, A. Amić, Z. Marković, Importance of hydrogen bonding and aromaticity indices in QSAR modeling of the antioxidative capacity of selected (poly)phenolic antioxidants, *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, **2017**, 72 (00) 240–245.

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1093326316304235>

ИФ: 1.885 (2017)

Категорија: Рачунарство, Интердисциплинарне примене (56/105)

Цитираност (без аутоцитата): 24

Број аутора: 6

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 4,17

- 1.5. S. Radenković**, M. Antić, J. Đurđević, **S. Jeremić**, Electronic structure study of the biradical pleiadene-like molecules, *Monatshefte für Chemie - Chemical Monthly*, **2014**, 145 (12), 281–290.

<http://link.springer.com/article/10.1007/s00706-013-1114-4>

ИФ: 1.629 (2012)

Категорија: Хемија, Мултидисциплинарност (63/152)

Цитираност (без аутоцитата): 5

Број аутора: 4

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 5

- 1.6. S. Jeremić**, S. Šehović, N. Manojlović, Z. Marković, Antioxidant and free radical scavenging activity of purpurin, *Monatshefte für Chemie - Chemical Monthly*, **2012**, 143 (3) 427–435.

<http://link.springer.com/article/10.1007/s00706-011-0695-z>

ИФ: 1.629 (2012)

Категорија: Хемија, Мултидисциплинарност (63/152)

Цитираност (без аутоцитата): 19

Број аутора: 4

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 5

- 1.7. A. T. Balaban**, I. Gutman, **S. Jeremić**, J. Đurđević, Effect of benzo-annulation on cyclic conjugation, *Monatshefte für Chemie - Chemical Monthly*, **2011**, 142 (1) 53–57.

<http://link.springer.com/article/10.1007/s00706-010-0418-x>

ИФ: 1.532 (2011)

Категорија: Хемија, Мултидисциплинарност (69/154)

Цитираност (без аутоцитата): 5

Број аутора: 4

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 5

- 1.8. J. Dimitrić Marković, Z. Marković, D. Milenković, **S. Jeremić**, Application of comparative vibrational spectroscopic and mechanistic studies in analysis of fisetin structure, *Spectrochimica Acta Part A*, **2011**, 83 (1) 120–129.
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1386142511007086>

ИФ: 2.098 (2011)
Категорија: Спектроскопија (17/42)
Цитираност (без аутоцитата): 23
Број аутора: 4
Тип рада: нумеричка симулација
Број поена = 5

Радови у међународном часопису (M23 = 3)

(M23_(укупно)) = 12 × 3 = 36)

(M23_(нормирано)) = 11 × 3 + 1 × 2,50 = 35,50)

- 1.9. Z. Marković, **S. Jeremić**, J. Dimitrić Marković, M. Stanojević Pirković, D. Amić, Influence of structural characteristics of substituents on the antioxidant activity of some anthraquinone derivatives, *Computational and Theoretical Chemistry*, **2016**, 1077 (0) 25–31. <https://doi.org/10.1016/j.comptc.2015.10.004>

ИФ: 1.549 (2016)
Категорија: Хемија, Физичка хемија (101/146)
Цитираност (без аутоцитата): 22
Број аутора: 5
Тип рада: нумеричка симулација
Број поена = 3

- 1.10. A. Amić, Z. Marković, J. Dimitrić Marković, **S. Jeremić**, B. Lučić, D. Amić, Free radical scavenging and COX-2 inhibition by simple colon metabolites of polyphenols: A theoretical approach, *Computational Biology and Chemistry*, **2016**, 65 (0) 45–53.
<https://doi.org/10.1016/j.compbiolchem.2016.09.013>

ИФ: 1.331 (2016)
Категорија: Рачунарство, Интердисциплинарне примене (70/105)
Цитираност (без аутоцитата): 23
Број аутора: 6
Тип рада: нумеричка симулација
Број поена = 2,5

- 1.11. **S. Jeremić**, N. Filipović, A. Peulić, Z. Marković, Thermodynamical aspect of radical scavenging activity of alizarin and alizarin red S. Theoretical comparative study, *Computational and Theoretical Chemistry*, **2014**, 1047 (0) 15–21.
<https://doi.org/10.1016/j.comptc.2014.08.007>

ИФ: 1.545 (2014)
Категорија: Хемија, Физичка хемија (95/139)
Цитираност (без аутоцитата): 26
Број аутора: 4
Тип рада: нумеричка симулација
Број поена = 3

- 1.12. Z. Marković, N. Manojlović, **S. Jeremić**, M. Živić, HPLC, UV-Vis and NMR spectroscopic and DFT characterization of purpurin isolated from *Rubia tinctorum* L., *Hemijska industrija*, **2013**, 67 (1) 77–88.

<https://doiserbia.nb.rs/Article.aspx?id=0367-598X1200058M>

ИФ: 0.562 (2013)

Категорија: Инжењеринг, Хемија (103/133)

Цитираност (без аутоцитата): 11

Број аутора: 4

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 3

- 1.13. I. Gutman, S. Marković, **S. Jeremić**, A Case of Breakdown of the Kekulé-Structure Model, *Polycyclic Aromatic Compounds*, **2010**, 30 (4) 240-246.

<http://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/10406638.2010.503162?journalCode=gpol20>

ИФ: 0.982 (2010)

Категорија: Хемија, Органска хемија (39/56)

Цитираност (без аутоцитата): 10

Број аутора: 3

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 3

- 1.14. **S. Jeremić**, S. Radenković, I. Gutman, Cyclic conjugation in benzo-annulated triphenylenes, *Journal of the Serbian Chemical Society*, **2010**, 75 (7) 943–950.

<https://doiserbia.nb.rs/img/doi/0352-5139/2010/0352-51391000068J.pdf>

ИФ: 0.820 (2009)

Категорија: Хемија, Мултидисциплинарност (87/140)

Цитираност (без аутоцитата): 2

Број аутора: 3

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 3

- 1.15. S. Marković, J. Đurđević, **S. Jeremić**, I. Gutman, Diradical character of some fluoranthenes., *Journal of the Serbian Chemical Society*, **2010**, 75 (9) 1241–1249.

<https://doiserbia.nb.rs/img/doi/0352-5139/2010/0352-51391000080M.pdf>

ИФ: 0.820 (2009)

Категорија: Хемија, Мултидисциплинарност (87/140)

Цитираност (без аутоцитата): 16

Број аутора: 4

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 3

- 1.16. B. Furtula, I. Gutman, **S. Jeremić**, S. Radenković, Effect of a ring on the cyclic conjugation in another ring: applications to acenaphthylene-type polycyclic conjugated molecules, *Journal of the Serbian Chemical Society*, **2010**, 75 (1) 83–90.

<https://doiserbia.nb.rs/Article.aspx?id=0352-51391001083F>

ИФ: 0.820 (2009)
Категорија: Хемија, Мултидисциплинарност (87/140)
Цитираност (без аутоцитата): 2
Број аутора: 4
Тип рада: нумеричка симулација
Број поена = 3

- 1.17. S. Jeremić**, S. Radenković, I. Gutman, Cyclic conjugation in benzo-annelated coronenes, *Macedonian Journal of Chemistry and Chemical Engineering*, **2010**, 29 (1) 63–69. <https://doi.org/10.20450/mjccce.2010.174>

ИФ: 0.459 (2010)
Категорија: Хемија, Мултидисциплинарност (121/147)
Цитираност (без аутоцитата): 1
Број аутора: 3
Тип рада: нумеричка симулација
Број поена = 3

- 1.18. I. Gutman, S. Jeremić**, V. Petrović, Extending the phenyl-cyclopentadienyl rule, *Indian Journal of Chemistry*, **2009**, 48A (05) 658–662. <https://nopr.niscpr.res.in/bitstream/123456789/4102/1/IJCA%2048A%285%29%20658-662.pdf>

ИФ: 0.685 (2007)
Категорија: Хемија, Мултидисциплинарност (86/127)
Цитираност (без аутоцитата): 4
Број аутора: 3
Тип рада: нумеричка симулација
Број поена = 3

- 1.19. S. Radenković, W. Linert, I. Gutman, S. Jeremić**, Pairwise energy effects of rings in benzo-annelated perylenes, *Indian Journal of Chemistry*, **2009**, 48A (12) 1657–1661. [https://nopr.niscpr.res.in/bitstream/123456789/6754/1/IJCA%2048A\(12\)%201657-1661.pdf](https://nopr.niscpr.res.in/bitstream/123456789/6754/1/IJCA%2048A(12)%201657-1661.pdf)

ИФ: 0.685 (2007)
Категорија: Хемија, Мултидисциплинарност (86/127)
Цитираност (без аутоцитата): 1
Број аутора: 4
Тип рада: нумеричка симулација
Број поена = 3

- 1.20. I. Gutman, B. Furtula, S. Jeremić**, N. Turković, Electron content of rings of fully benzenoid hydrocarbons, *Journal of the Serbian Chemical Society*, **2005**, 70 (10) 1199–1204. <https://doiserbia.nb.rs/Article.aspx?id=0352-51390510199G>

ИФ: 0.522 (2004)
Категорија: Хемија, Мултидисциплинарност (85/124)
Цитираност (без аутоцитата): 2
Број аутора: 4
Тип рада: нумеричка симулација
Број поена = 3

2. Зборници међународних научних скупова (M30)

Укупно: M30 = 8,55

Саопштење са међународног скупа штампано у целини (M33 = 1)

(M33_(укупно)) = 6 × 1 = 6)

(M33_(нормирано)) = 4 × 1 + 1 × 0,83 + 1 × 0,62 = 5,45)

2.1. J. Đorović, Z. Marković, **S. Jeremić**, D. Milenković, Investigation of the antioxidative and radical scavenging activities of 2,4-, 2,5-, 3,5-dihydroxybenzoic acids, 2nd EAI International Conference on Future Access Enablers of Ubiquitous and Intelligent Infrastructures (Fabulous 2016), 24th – 25th October **2016**, Belgrade, Serbia, str. 1-6. <https://fabulous-conf.eai-conferences.org/2016/show/accepted-papers.html>

Број аутора: 4

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 1

2.2. D. Milenković, Z. Marković, **S. Jeremić**, D. Dimić, J. Dimitrić Marković, Vibrational spectroscopic analysis of kaempferol: A combined experimental and theoretical study, 13th International Conference of Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry, 26th – 30th September **2016**, Belgrade, Serbia, str. 131-134. ISBN: 978-86-82475-34-7

https://npao.ni.ac.rs/files/2323/M33-10_003d1.pdf

Број аутора: 5

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 1

2.3. A. Amić, J. Dimitrić Marković, **S. Jeremić**, I. Gađanski, B. Lučić, D. Amić, Free radical scavenging potency of 3-hydroxyphenylacetic acid: A DFT study, 15th International Conference on Informatics and BioEngineering (BIBE2015), 2nd – 4th November **2015**, Belgrade, Serbia, str. 1-5. ISBN: 978-1-4673-7982-3 ; IEEE Catalog Number: CFP15266-USB. <https://www.infona.pl/resource/bwmeta1.element.ieee-art-000007367665>

Број аутора: 6

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 0.83

2.4. **S. R. Jeremić**, A. D. Amić, Z. S. Marković, Mechanisms of scavenging reactions of alizarin with hydroperoxyl and methylperoxyl radicals, 15th International Conference on Informatics and BioEngineering (BIBE2015), 2nd – 4th November **2015**, Belgrade, Serbia, str. 1-5. ISBN: 978-1-4673-7982-3 ; IEEE Catalog Number: CFP15266-USB.

<https://www.infona.pl/resource/bwmeta1.element.ieee-art-000007367659>

Број аутора: 3

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 1

2.5. **S. Jeremić**, Z. Marković, V. Stepanić, Investigation of antioxidative activity mechanisms of alizarin molecule, 4th International Congress of Serbian Society of Mechanics, 4th – 7th June **2013**, Vrnjačka Banja, Serbia, str. 803-807. ISBN: 978-86-909973-5-0 ; COBISS.SR-ID 198308876.

Број аутора: 3

Тип рада: нумеричка симулација
Број поена = 1

2.6. J. M. Dimitrić Marković, Z. S. Marković, T. P. Brdarić, D. Milenković, **S. Jeremić**, V. Stepanić, B. Lučić, D. Amić, A joint application of spectroscopic and theoretical approaches in evaluation of antioxidant activity of kaempferol and its iron complex, 11th International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry, 22th – 26th September **2012**, Belgrade, Serbia, str. 131-133. ISBN: 978-86-82475-27-9 Volume 1; COBISS.SR-ID 193432332; ISBN 978-86-82475-28-6 Volume II; COBISS.SR-ID 193433356.

<https://www.socphyschemserb.org/media/publications/physical-chemistry-2012.pdf>

Број аутора: 8

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 0,62

Саопштење са међународног скупа штампано у целини (M34 = 0.5)

(M34_(укупно)) = 7 × 0,5 = 3,5

(M34_(нормирано)) = 2 × 0,5 + 5 × 0,42 = 3,10

2.7. J. Đorović, **S. Jeremić**, E. Avdović, A. Amić, J. M. Dimitrić Marković, Antioxidant Activity of the Carboxylate Anions of the Selected Dihydroxybenzoic Acids, 4th South-East European Conference on Computational Mechanics, SEECM 2017, 3rd – 4th July **2017**, Kragujevac, Serbia, str. 24, T.2.3. ISBN: 978-86-921243-0-3

Број аутора: 5

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 0.5

2.8. A. Amić, Z. Marković, J. Dimitrić Marković, **S. Jeremić**, B. Lučić, D. Amić, Thermodynamics of 2H⁺/2e⁻ Free Radical Scavenging Mechanisms of 3-(4-Hydroxy-3-Methoxyphenyl)Propanoic Acid, 4th South-East European Conference on Computational Mechanics, SEECM 2017, 3rd – 4th July **2017**, Kragujevac, Serbia, str. 24, T.2.2. ISBN: 978-86-921243-0-3

Број аутора: 6

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 0.42

2.9. **S. Jeremić**, Z. Dolićanin, J. Đorović, A. Amić, M. Stanojević Pirković, Z. Marković, Estimation of Antioxidative Capacity of Anthrurufin, 4th South-East European Conference on Computational Mechanics, SEECM 2017, 3rd – 4th July **2017**, Kragujevac, Serbia, str. 25, T.3.2. ISBN: 978-86-921243-0-3

Број аутора: 6

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 0.42

2.10. M. Stanojević Pirković, **S. Jeremić**, J. M. Dimitrić Marković, D. Dimić, D. Amić, D. Milenković, Computational Molecular Docking Studies of Kaempferol-Procalcitonin Interaction, 4th South-East European Conference on Computational Mechanics, SEECM 2017, 3rd – 4th July **2017**, Kragujevac, Serbia, str. 26, T.3.6. ISBN: 978-86-921243-0-3

Број аутора: 6

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 0,42

2.11 A. Amić, Z. Marković, J. Dimitrić Marković, **S. Jeremić**, B. Lučić, D. Amić, Radical scavenging potency of 4-hydroxyphenylpropionic acid: a theoretical approach (Studija potencijala hvatanja radikala 4-hidroksifenilpropionskom kiselinom), 25th Croatian Meeting of Chemists and Chemical Engineers with international participation, 3rd symposium “VLADIMIR PRELOG”, 19th – 22nd April **2017**, Poreč, Croatia, str. 106.

https://www.hdki.hr/images/50011340/25_HSKIKI_2017_KNJIGA_SAZETAKA.pdf

Број аутора: 6

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 0,42

2.12. A. Amić, Z. Marković, J. M. Dimitrić Marković, **S. Jeremić**, B. Lučić, D. Amić, Radical scavenging and COX-2 inhibition by colon metabolites of polyphenols: A theoretical approach. 10th Joint Meeting on Medicinal Chemistry, 25th – 28th June **2017**, Dubrovnik, Croatia, str. P-2. ISBN: 978-953-55232-8-4

Број аутора: 6

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 0,42

2.13. **S. Jeremić**, M. Filipović, Z. Marković, QSAR for predicting scavenger potency of simply phenolic antioxidants based on hydrogen bond energies, thermodynamic and aromaticity parameters, International Symposium on Multidisciplinary Studies (ISMS), 20th – 23rd October **2016**, Belgrade, Serbia, str. 58. ISBN:978-605-180-528-3

[https://ismsemp.com/ISMS/gecmis_sempozyum/ISMS_2016_%20Belgrade_Abstract%20Book%20\(2\).pdf](https://ismsemp.com/ISMS/gecmis_sempozyum/ISMS_2016_%20Belgrade_Abstract%20Book%20(2).pdf)

Број аутора: 3

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 0,5

3. Радови у часописима националног значаја (M50)

Укупно: M50 = 1

Рад у националном часопису (M53 = 1)

(M53_(укупно) = 1 × 1 = 1)

(M53_(нормирано) = 1 × 1 = 1)

3.1. Z. Marković, D. Milenković, J. Đorović, **S. Jeremić**, Solvation enthalpies of the proton and electron in polar and non-polar solvents, *Journal of the Serbian Society for Computational Mechanics*, **2013**, 7 (2) 1–9.

http://www.sscm.kg.ac.rs/jsscm/downloads/Vol7No2/Vol7No2_01.pdf

Број аутора: 4

Тип рада: нумеричка симулација

Цитираност (без аутоцитата): 17

Број поена = 1

4. Зборници националних научних скупова (M60)

Укупно: M60 = 9

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

(M63_(укупно)) = 9 × 1 = 9

(M63_(нормирано)) = 9 × 1 = 9

4.1. Z. Marković, **S. Jeremić**, M. Filipović, D. Milenković, J. Đorović, QSAR model for predicting antioxidant capacity of some polyphenolic antioxidants, XXI Savetovanje o biotehnologiji, 11-12. mart 2016. Čačak, Srbija, Zbornik radova, str. 775-780. ISBN: 978-86-87611-41-2 (Vol. 1); ISBN 978-86-87611-42-9 (Vol. 2); COBISS.SR-ID 221904396).
https://afc.edu.rs/files/data/sb/zbornik/Zbornik_radova_SB2016_-_2.pdf

Број аутора: 5

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 1

4.2. Z. Marković, D. Milenković, **S. Jeremić**, J. Đorović, J. Dimitrić Marković, Examination of electron transfer mechanism of cyanidin, XXI Savetovanje o biotehnologiji, 11-12. mart 2016. Čačak, Srbija, Zbornik radova, str. 775-780. ISBN: 978-86-87611-41-2 (Vol. 1); ISBN 978-86-87611-42-9 (Vol. 2); COBISS.SR-ID 221904396).
https://afc.edu.rs/files/data/sb/zbornik/Zbornik_radova_SB2016_-_2.pdf

Број аутора: 5

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 1

4.3. Z. Marković, **S. Jeremić**, D. Milenković, J. Đorović, Mechanisms of antioxidative reaction of alizarin with free radicals, XX Savetovanje o biotehnologiji, 13-14. mart 2015. Čačak, Srbija, Zbornik radova, str. 367-373. ISBN: 978-86-87611-35-1; COBISS.SR-ID 213667852
https://afc.edu.rs/files/data/sb/zbornik/Zbornik_radova_XX_SB2015.pdf

Број аутора: 4

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 1

4.4. **S. Jeremić**, Z. Marković, D. Milenković, J. Đorović, DFT investigations of antioxidant activity of alizarin red S, XIX Savetovanje o biotehnologiji, 7-8. mart 2014. Čačak, Srbija, Zbornik radova, str. 257-262. ISBN: 978-86-87611-31-3

Број аутора: 4

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 1

4.5. D. Milenković, Z. Marković, J. Dimitrić-Marković, **S. Jeremić**, J. Đorović, Investigation of antioxidant mechanisms of kaempferol with hydroxyl radical and superoxide radical anion, XIX Savetovanje o biotehnologiji, 7-8. mart 2014. Čačak, Srbija, Zbornik radova, str. 287-292. ISBN: 978-86-87611-31-3

Број аутора: 5

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 1

4.6. J. Đorović, Z. Marković, **S. Jeremić**, D. Milenković, Investigation of reaction of gallic acid with superoxide radical anion, hydroxyl radical and methyl peroxy radical, XIX Savetovanje o biotehnologiji, 7-8. mart **2014**. Čačak, Srbija, Zbornik radova, str. 293-298. ISBN: 978-86-87611-31-3

Број аутора: 4

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 1

4.7. **S. Jeremić**, Z. Marković, D. Milenković, J. Đorović, G. Jovanović, Scavenging potency of anion of gallic acid with different radicals, XIX Savetovanje o biotehnologiji, 7-8. mart **2014**. Čačak, Srbija, Zbornik radova, str. 305-310. ISBN: 978-86-87611-31-3

Број аутора: 5

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 1

4.8. J. Đorović, Z. Marković, D. Milenković, **S. Jeremić**, D. Amić, Ispitivanje hemijskog ponašanja kvercetina, XVIII Savetovanje o biotehnologiji, 15-16. mart **2013**. Čačak, Srbija, Zbornik radova, str. 459-464. ISBN: 978-86-87611-29-0

Број аутора: 5

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 1

4.9. D. Milenković, Z. Marković, J. M. Dimitrić Marković, J. Đorović, **S. Jeremić**, Ispitivanje reakcionih mehanizama bajkaleina sa hidroksi radikalom, XVIII Savetovanje o biotehnologiji, 15-16. mart **2013**. Čačak, Srbija, Zbornik radova, str. 465-470. ISBN: 978-86-87611-29-0

Број аутора: 5

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 1

5. Одбрањена докторска дисертација (M70 = 6)

Светлана Р. Јеремих, „Прилог познавању електронских особина полибензо-анелираних конјугованих молекула“, Докторска дисертација, Природно-математички факултет у Крагујевцу, Универзитет у Крагујевцу, датум одбране: 25.06.2012.

Број аутора: 1

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 6

Укупно А+Б: M = M13 + M21 + M22 + M23 + M33 + M34 + M53 + M63 + M64 + M70
= 80,50 + 98,39 = 178,89

Укупан ИФ А+Б = 35,562 + 26,514 = 62,076

Анализа радова објављених након избора у звање научни сарадник

Радови др Светлане Јеремић публиковани након избора у звање научни сарадник се у највећој мери баве применом теорије функционала густине (DFT методе) у циљу испитивања антиоксидативног капацитета природних и синтетичких полифенолних једињења и утврђивањем доминантних механизма антиоксидативне активности. У овим радовима је, на основу израчунатих кинетичких и термодинамичких параметара испитиваних једињења и њихових реакција са слободним радикалима, процењена потенцијална антиоксидативна активност испитиваних једињења. На тај начин вршено је предвиђање оперативних механизма антирадикалске активности једињења у растварачима различите поларности у присуству одабраних реактивних кисеоничних врста (публикације А-1.1, А-2.1, А-2.3, А-2.5, А-2.7.). Објашњење показане хемијске активности једињења добијено је анализом мапе електростичког потенцијала реагујућих врста, као и на основу анализе граничних молекулских орбитала и HOMO-LUMO енергетског јаза.

Развијањем одговарајућег QSAR математичког модела као показатеља зависности активности молекула од његове структуре, омогућено је предвиђање хемијске реактивности структурно сличних једињења у зависности од броја и положаја функционалних група, као и у зависности од вредности израчунатих дескриптивних параметара (А-2.13.).

Процена реактивности и структурна анализа неких испитиваних једињења вршена је поређењем спектра добијених експерименталним путем и оних добијених применом DFT методе (А-2.10, А-2.12.). Како је одређивањем корелационог фактора показан висок ниво слагања експериментално добијених спектра са теоријским спектрима добијеним применом одговарајуће комбинације DFT методе и базисног скупа, потврђено је да оптимизована геометрија молекула умногоме одговара највероватнијој геометрији стварног молекула, што је надаље послужило као услов за детаљнију анализу структурних карактеристика и хемијске реактивности испитиваних молекула.

Потенцијал испитиваних једињења да инхибирају одређене протеине од значаја за развој неких болести у људском организму, или за развој патогених микророорганизама, је у радовима др Светлане Јеремић процењена применом *in silico* симулација молекулског докинга и молекулске динамике (А-2.1, А-2.2, А-2.3, А-2.4, А-2.5.). На овај начин добијен је бољи увид у механизам инхибиције неких протеина одговорних за развој неких болести (А-2.1, А-2.2, А-2.3.), или, са друге стране, у механизам антимикуробног деловања испитиваног једињења (А-2.4, А-2.5.).

За једињења чији термодинамички и кинетички параметри указују на висок капацитет антиоксидативне и антирадикалске активности, а методе молекулског докинга и молекулске динамике на висок инхибиторски потенцијал, у радовима кандидаткиње су даље испитани параметри који указују на могућност апсорпције, дистрибуције, метаболизма и излучивања испитиваног једињења, као и његове токсичности (ADMET анализа) (А-2.9.). На овај начин др Светлана Јеремић се у оквиру свог научног рада бавила проценом могућности употребе одабраних природних или синтетичких једињења у медицини и фармацији.

Део истраживања Светлане Јеремић односи се на испитивање реактивности и структурних карактеристика комплекса метала органских молекула применом DFT методе, и кинетичких и термодинамичких параметара реакције. У том смислу одређени су оперативни механизми супституционих реакција неких органометалних комплекса, а резултати добијени нумеричким симулацијама упоређени су са резултатима добијеним експерименталним путем (А-2.6, А-2.8, А-2.11.).

Избор 5 најзначајнијих научних остварења кандидата објављених након избора у звање научни сарадник

1. Z. Marković, A. V. Komolkin, A. V. Egorov, D. Milenković, **S. Jeremić**, Alizarin as a potential protector of proteins against damage caused by hydroperoxyl radical, *Chemico-Biological Interactions*, **2023**, 373, 110395.

<https://doi.org/10.1016/j.cbi.2023.110395>

ИФ: 5.100 (2022)

Категорија: M21

Цитираност (без аутоцитата): 2

У овом раду испитивани су механизми антиоксидативне активности природног антрахинона ализарина, за који се зна да има умерени антиоксидативни капацитет. Ализарин има и способност инхибирања фосфорилације ERK протеина, кључног у сигналним путевима, чиме се инхибира пролиферација ћелија остеосаркома и рака дојке. У овом раду су применом теорије функционала густине (DFT, енгл. Density functional theory) испитани механизми деактивације хидропероксидног радикала ализарином. У том смислу као могући антиоксидативни механизми разматрани су механизам апстракције атома водоника (НАА, енгл. Hydrogen atom abstraction), механизам формирање радикалских адуката (RAF, енгл. Radical adduct formation) и механизам преноса електрона (SET, енгл. Single electron transfer). Одговарајући термодинамички параметри указали су на то да је НАА механизам једини повољан механизам антиоксидативног деловања ализарина. Поред тога, разматрана су два могућа начина апстракције атома водоника: пренос атома водоника (НАТ, енгл. Hydrogen atom transfer) и спрегнути пренос протона и електрона (PCET, енгл. Proton-coupled electron transfer). Испитивања су вршена у води и бензену као растварачима различите поларности. За утврђивање повољнијег од два могућа механизма апстракције атома водоника коришћен је кинетички приступ заснован на примени Теорије прелазног стања (TST, енгл. Transition state theory) у комбинацији са QТАИМ анализом (енгл. Quantum theory of atoms in molecules) и анализом SOMO орбитала (енгл. Single occupied molecular orbital) у прелазном стању. Методе молекулског докинга и молекулске динамике примењене су за процену могућности везивања ализарина за секвенцу протеина ApoB-100, који представља протеинску компоненту LDL молекула. Утврђено је да ализарин показује способност да заштити полипептиде од штетног деловања хидропероксидног радикала уколико се нађе између полипептидног ланца и ове реактивне кисеоничне врсте.

2. **S. Jeremić**, A. Amić, M. Stanojević-Pirković, Z. Marković, Selected anthraquinones as potential free radical scavengers and P-glycoprotein inhibitors, *Organic and Biomolecular Chemistry*, **2018**, 16 (11), 1890–1902.

<https://doi.org/10.1039/C8OB00060C>

ИФ: 3.564 (2016)

Категорија: M21

Цитираност (без аутоцитата): 25

Оксидативни стрес настаје као последица нарушавања хомеостазе у организму, услед чега се повећава количина штетних слободнорадикалских врста, што може имати бројне негативне последице на здравље. Улога антиоксиданата је да учествује у превенцији оксидативног стреса. У овом раду испитиван је капацитет шест структурно сличних антрахинона (ализарина, пурпурина, хризофанола, емодина, алое-емодина и 1,3,8-трихидроксиантрахинона) да деактивирају десет изабраних хидроксилиних и

хидропероксидних слободнорадикалских врста. У том смислу разматрана су три могућа механизма антиоксидативне реакције, и то НАТ механизам (енгл. Hydrogen atom transfer), SET-PT механизам (енгл. Single-electron transfer followed by proton transfer) и SPLET механизам (енгл. Sequential proton loss electron transfer). Закључци о могућем механизму деактивације слободнорадикалских врста изведени су на основу вредностзи израчунатих Гибсових слободних енергија. Оптимизација геометрије и израчунавање одговарајућих енергија свих учесника у реакцијама антиоксидативног деловања извршене су применом M06-2X/6-311++G(d,p) нивоа теорије функционала густине (DFT, енгл. Density functional theory). Као реакциони медијуми различитих поларности коришћени су бензен, пентилетаноат, диметилсулфоксид и вода. Нађено је да су НАТ и SPLET механизми оперативни и конкурентни механизми у свим испитиваним растварачима, док SET-PT није термодинамички повољан нити у једном од разматраних растварача. Највећи антиоксидативни капацитет показали су ализарин и пурпурн. Лакоћа деактивације слободнорадикалских врста одговара следећем низу: $\cdot\text{OH} > (\text{CH}_3)_3\text{C}\cdot\text{O} \approx \cdot\text{OCH}_3 > \text{CCl}_3\text{-O}\cdot > \text{PhO}\cdot > \cdot\text{OOH} \approx \text{CH}_2=\text{CH}\text{-O}\cdot \approx \text{CH}_3\text{-O}\cdot \approx \text{CH}_2=\text{CH}\text{-CH}_2\text{-O}\cdot \gg \text{O}_2^{\cdot-}$. Инхибиторска активност анјона испитиваних антрахинона разматрана је применом методе молекулског докинга. Добијени резултати указали су на то да анјони свих испитиваних једињења показују инхибиторску активност према П-гликопротеину (енгл. P-glycoprotein) при физиолошким условима, што је указало на могућност употребе испитиваних антрахинона као агенаса који се користе у спречавању резистенције на антиканцерогене терапеутике.

3. **Ž. Milanović, S. Jeremić, M. Antonijević, D. Dimić, Đ. Nakarada, E. Avdović, Z. Marković**, The inhibitory potential of 4,7-dihydroxycoumarin derivatives on ROS-producing enzymes and direct $\text{HOO}\cdot/\text{O}_2^{\cdot-}$ radical scavenging activity – a comprehensive kinetic DFT study, *Free Radical Research*, **2024**, 58 (8-9), 493–508. <https://doi.org/10.1080/10715762.2024.2400674>
ИФ: 4.288 (2021)
Категорија: M22
Цитираност (без аутоцитата): 0

У овом раду проучавана је антирадикалска активност три синтетисана кумаринска деривата, и то су: (Е)-3-(1-((2-хидроксифенил)амино)етилиден)-2,4-диоксихроман-7-ил ацетат (А1-ОН), затим (Е)-3-(1-((3-хидроксифенил)амино)етилиден)-2,4-диоксихроман-7-ил ацетат (А2-ОН), и (Е)-3-(1-((4-хидроксифенил)амино)етилиден)-2,4-диоксихроман-7-ил ацетат (А3-ОН), и њихова способност да деактивирају $\text{HOO}\cdot/\text{O}_2^{\cdot-}$ радикалске врсте. Истраживање се заснивало на примени ESR методе (енгл. Electron spin resonance) и одређивања кинетичких параметара добијених применом DFT методе (енгл. Density functional theory). Термодинамички и кинетички параметри испитиваних антирадикалских механизма (f-HAT (енгл. Formal hydrogen atom transfer), RAF (енгл. Radical adduct Formation), SPLET (енгл. Sequential proton loss followed by electron transfer), и SET-PT (енгл. Single-electron transfer followed by proton transfer)) разматрани су применом QM-ORSA приступа (енгл. Quantum Mechanics-based test for Overall free Radical Scavenging Activity) при физиолошким условима. Резултати ESR анализе указали су да антирадикалска активност испитиваних једињења опада у следећем низу: А1-ОН (58,7%) > А2-ОН (57,5%) > А3-ОН (53,1%). Анализа кинетичких параметара указала је на то да је f-HAT механизам доминантан у инактивацији $\text{HOO}\cdot$ радикала. Дефинисан је нови механизам SPL-RAF (енгл. Sequential Proton Loss followed by Radical Adduct Formation) као могући механизам деактивације $\text{O}_2^{\cdot-}$ радикалске врсте. Активност испитиваних једињења према $\text{O}_2^{\cdot-}$ радикалу опада у следећем низу: А2-ОН ($1,26 \cdot 10^6$

$M^{-1}s^{-1}$) > A3-OH ($7,71 \cdot 10^5 M^{-1}s^{-1}$) > A1-OH ($4,22 \cdot 10^5 M^{-1}s^{-1}$). Методе молекуларског докинга и молекуларске динамике примењене су како би се утврдила инхибиторска активност испитиваних молекула према следећим ензимима: липооксигеназа (LOX), миелопероксидаза (MPO), NAD(P)H оксидација (NOX), и ксантин оксидација (XOD). Афинитет испитиваних молекула према ензимима опада у низу: XOD > LOX > NOX > MPO.

4. D. Milenković, J. M. Dimitrić Marković, D. Dimić, **S. Jeremić**, D. Amić, M. Stanojević Pirković, Z. S. Marković, Structural characterization of kaempferol: a spectroscopic and computational study, *Macedonian Journal of Chemistry and Chemical Engineering*, **2019**, 38 (1) 49–62.

<https://doi.org/10.20450/mjce.2019.1333>

ИФ: 0.829 (2019)

Категорија: M23

Цитираност (без аутоцитата): 16

У овом раду је примењена метода функционала густине (DFT метода) како би се утврдила најповољнија структурна геометрија природног флавоноида кемферола, и како би се одредиле и објасниле његове спектроскопске карактеристике. Електронска структура кемферола утврђена је применом NBO анализе (енгл. Natural Bond Orbital). Извршена је асигнација и поређење експериментално добијених IR и Раманских спектра са најбоље усаглашеним теоријским IR и Раманским спектрима. Нађено је да се хемијска померања у експериментално добијеним ^{13}C и 1H NMR спектрима одлично слажу са одговарајућим теоријским хемијским померањима добијеним применом GIAO методе (енгл. Gauge Independent Atomic Orbital). Корелациони коефицијент и средње вредности апсолутне грешке добијене применом B3LYP-D3 функционала указали су на то да је овај метод адекватан за описивање NMR спектра кемферола. Метода молекуларског докинга примењена је како би се испитао потенцијал кемферола да инхибира хумани прокалцитонин. Инхибиторска активност одређена је у симулацији која је разматрала 10 конформација лиганда унутар ригидне структуре протеина.

5. **S. Jeremić**, T. H. Tran, Z. Marković, C. T. Ngo, D. Q. Dao, Insight into interaction properties between mercury and lead cations with chitosan and chitin: density functional theory studies, *Computational and Theoretical Chemistry*, **2018**, 1138, 99–106. <https://doi.org/10.1016/j.comptc.2018.06.010>

ИФ: 1.549 (2016)

Категорија: M23

Цитираност (без аутоцитата): 13

У овом раду је примењена теорија функционала густине (DFT) како би се анализирале интеракције између хитозана и хитина са јонима живе (Hg(I), Hg(II)) и олова (Pb(I), Pb(II)) у одсуству молекула воде, или у присуству од једног до три молекула воде. Сва израчунавања извршена су применом M06-2X/LanL2DZ нивоа теорије, и на молекулима глукозамина и N-ацетилглукозамина као моделима мономерних јединица биополимера хитозана и хитина. Оптимизоване су геометрије свих комплекса, и израчунате су енталпије и Гибсове слободне енергије свих интеракција. Добијене вредности енергија указале су на то да се јони Hg(I) и Pb(I) најповољније везују за глукозамин у позицији O4/N5, док је координација са N-ацетилглукозамином најповољнија преко положаја O3/O4. Најповољнији положај за координацију оба мономера са Hg(II) и Pb(II) јонима је

у свим случајевима O3/O4 положај. Присуство мелукула воде занемарљиво утиче на положај стварања везе приликом комплексирања, али има значајан утицај на стабилизацију комплекса метала услед формирања водоничних веза. Комплекси Pb(I) јона су стабилнији него комплекси Hg(I) јона, док су комплекси Pb(II) мање стабилни од комплекса Hg(II) јона. Резултати добијени теоријским приступом су у сагласности са резултатима добијеним експерименталним путем. Примена NBO анализе (енгл. Natural bond orbital) потврдила је да се метал-лиганд веза ствара услед тога што јони метала прихватају усамљени пар електрона са хетероатома лиганда у своје празне орбитале.

III КВАЛИТАТИВНА ОЦЕНА НАУЧНОГ ДОПРИНОСА

6. 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)

a. Чланство у одборима међународних научних конференција

Др Светлана Јеремић је 2023. године била члан међународног организационог одбора Друге међународне конференције за хемо и биоинформатику (2nd International Conference on Chemo and BioInformatics, 28th – 29th September 2023, Kragujevac, Serbia). <https://www.iccbikg2023.com/international-organazing-committee>

b. Чланства у одборима научних друштава

- Др Светлана Јеремић је у периоду 31.05.2022-31.05.2023. била члан Друштва за електронику, телекомуникацију, рачунарство, аутоматику и нуклеарну технику ЕТРАН.
- Кандидаткиња је члан Српског хемијског друштва и председник наставне секције подружнице Нови Пазар (<https://www.shd.org.rs/podruznice/novi-Pazar/>).

c. Чланства у уређивачким одборима часописа

Др Светлана Јеремић је гостујући уредник специјалног броја “Mechanisms of Organic Reactions” чији је издавач Open Access Journal by MDPI.

https://www.mdpi.com/journal/molecules/special_issues/40574CVYW2

d. Рецензије научних радова

Др Светлана Јеремић је рецензент у великом броју међународних научних часописа, неки од часописа који су затражили стручно мишљење кадидата су:

- Advanced theory and simulations, ISSN:2513-0390, IF(2023)= 2.900
- Beni-Suef University Journal of Basic and Applied Sciences, ISSN:2314-8543, IF(2023)= 2.500

- Chemistry & biodiversity, ISSN:1612-1872, IF(2023)= 2.300
- Chemistry Select, ISSN:2365-6549, IF(2023)= 1.900
- Computational and theoretical chemistry, ISSN: 2210-271X, IF(2023)= 3.000
- Foods, ISSN:2304-8158, IF(2023)= 4.700
- International journal of molecular sciences, ISSN:1422-0067, IF(2023)= 4.900
- Mathematics, ISSN:2227-7390, IF(2023)= 2.300
- Molecular physics, ISSN:0026-8976, IF(2023)= 1.600
- Molecules, ISSN:1420-3049, IF(2023)= 4.200
- Pharmaceuticals, ISSN:1424-8247, IF(2023)= 4.300
- Pharmaceutics, ISSN:1999-4923, IF(2023)= 4.900
- RSC advances, ISSN:2046-2069, IF(2023)= 3.900

и др. (<https://orcid.org/0000-0001-5571-6880>).

е. Рецензије уџбеника

Др Светлана Јеремић је по одлуци Наставно-научног већа Природно-математичког факултета Универзитета у Крагујевцу (бр. Одлуке 520/ XV-2) била члан комисије за оцену рукописа – уџбеника „Увод у хеометрију“ аутора др Бориса Фуртуле, редовног професора Природно-математичког факултета Универзитета у Крагујевцу.

7. 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)

а. Допринос развоју науке у земљи

Др Светлана Јеремић била је ангажована на већем броју међународних и на два национална пројекта. У периоду 2011-2019. године учествовала је у реализацији пројекта Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије под називом “Динамика нелинеарних физичкохемијских и биохемијских система са моделирањем и предвиђањем њихових понашања под неравнотежним условима“, којим је руководила проф. Др Љиљана Колар-Анић (евиденциони бр. 172015). Други национални пројекат у чијој је рализацији кандидаткиња у периоду 2011-2019. године учествовала је пројекат Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије под називом “Методе моделирања на више скала са применама у биомедицини“, којим је руководио проф. Др Милош Којић (евиденциони бр. 174028), и чијим је делом потпројектних активности руководила и сама кандидаткиња.

Др Светлана Јеремић била је учесник на више билатералних пројекта и других међународних пројекта, и то:

2023-2025: Билатерални пројекат СРБИЈА- СЛОВЕНИЈА за период 1.7.2023-30.6.2025, евиденциони бр. 337-00-110/2023-05/3, назив пројекта: “Elucidation of antioxidative and

inhibitory activities of tannins using combined experimental and computational approach / Проучавање антиоксидативне и инхибиторне активности танина применом експерименталних и рачунарских метода“, Министарство науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије. Светлана Јеремић је на овом пројекту учествовала као члан пројектног тима.

2014-2015: Билатерални пројекат СРБИЈА- ФРАНЦУСКА бр. 451-03-3455/2013-09/17, назив пројекта: “Развој теоријских методологија за процену антиоксидативне активности полифенола: пут ка применама у реалном животу“, Министарство просвете и науке Р. Србије. Светлана Јеремић је на овом пројекту учествовала као члан пројектног тима.

2011-2012: Билатерални пројекат СРБИЈА- ХРВАТСКА бр. 69-00-74/2010-02/01, назив: „Истраживање односа структуре и биолошке активности полифенола“, Министарство просвете и науке Р. Србије. Светлана Јеремић је на овом пројекту учествовала као члан пројектног тима.

2013-2016: TEMPUS пројекат бр. 544072-2013, Изградња капацитета српског образовања у области пољопривреде (CaSA). У циљу реализације пројектних активности на овом пројекту, Светлана Јеремић је дизајнирала кратак курс на тему „Технологија скроба и скробних модификата / Technology of starch and modified starch“

2018-2019: GfNA-Erasmus+ пројекат.

*У својству руководиоца пројектног тима из Србије кандидаткиња је конкурисала за суфинансирање билатералне научно-технолошке сарадње између Републике Србије и Републике Хрватске за период од 1. маја 2024. до 30. априла 2026. године. Захтев за суфинансирање наведене билатералне научно-технолошке сарадње је тренутно у процесу евалуације.

b. Менторство при изради мастер радова

Др Светлана Јеремић била је ментор при изради следећих мастер радова:

- **Ценана Феризовић**, назив мастер рада: „Теоријска компаративна студија антирадикалске активности 1,2,5-трихидроксиантрахинона и 1,2,5-трихидроксиитоксантона“, који је одбраћен 27.09.2019. године на Државном универзитету у Новом Пазару;
- **Едита Ћосовић**, назив мастер рада: „2-Хидрокси-1,4-нафтохинон као потенцијални антиоксидант у поларном и неполарном окружењу“, који је одбраћен 27.02.2023. године на Државном универзитету у Новом Пазару;
- **Зарфија Демировић**, назив мастер рада: „Теоријски приступ испитивању антиоксидативног капацитета 5-хидрокси-1,4-нафтохинона“, који је одбраћен 07.09.2023. године на Државном универзитету у Новом Пазару;
- **Семра Адиловић**, назив мастер рада: „Испитивање антиоксидативне активности

2-хидрокси-1,4-бензохинона“, који је одбрањен 22.12.2023. године на Државном универзитету у Новом Пазару;

- **Ајлана Гухдија**, назив мастер рада: „Теоријска студија антиоксидативне активности адреналина“, који је одбрањен 11.03.2024. године на Државном универзитету у Новом Пазару;
- **Емина Кујовић**, назив мастер рада: „Антрахинони: налажење у природи, синтеза, биолошка и хемијска активност, и примена“, који је одбрањен 22.10.2024. године на Државном универзитету у Новом Пазару;
- **Ханиса Хасановић**, назив мастер рада: „Испитивање антиоксидативног капацитета допамина применом теорије функционала густине“, који је одбрањен 22.10.2024. године на Државном универзитету у Новом Пазару.

Др Светлана Јеремић била је председник комисије за оцену и одбрану следећих мастер радова:

- **Џенета Нумановић**, назив мастер рада: „Испитивање механизма антиоксидативног деловања ескулетина“, који је одбрањен 26.08.2019. године на Државном универзитету у Новом Пазару;
- **Марко Антонијевић**, назив мастер рада: „Испитивање механизма антиоксидативног деловања 7-хидроксикумарина“, који је одбрањен 26.08.2019. године на Државном универзитету у Новом Пазару;
- **Хариса Бајрамлић**, назив мастер рада: „GC-MS анализа етарског уља биљне врсте *Citrus x bergamia* Risso et Poiteau (Rutaceae)“, који је одбрањен 29.09.2022. године на Државном универзитету у Новом Пазару;
- **Амина Гусинац**, назив мастер рада: „Изоловање и идентификација секундарних метаболита биљне врсте *Salvia aethiopis* L. (Lamiaceae)“, који је одбрањен 12.10.2022. године на Државном универзитету у Новом Пазару;
- **Вилдана Еминовић**, назив мастер рада: „Синтеза и карактеризација моноклеарног и хетеронуклеарних комплексних једињења Zn(II) са инетрним *terpy*-Cl лигандом“, који је одбрањен 27.02.2023. године на Државном универзитету у Новом Пазару.

с. Педагошки рад

Др Светлана Јеремић је запослена на Државном универзитету у Новом Пазару почев од 01.10.2010. године, прво у звању асистента, затим у звању асистента са докторатом, а тренутно у звању доцента. Почев од 2010. године, па све до првог избора у звање доцента 2017. године кандидаткиња је држала најпре вежбе, а затим и предавања (наставу под менторством) на великом броју предмета на основним студијама хемије (Општа и неорганска хемија, Примена рачунара у хемији, Обрада резултата мерења, Физичка хемија, Виша неорганска хемија, Пројектовање, Органометална хемија, Хемија и технологија угљених хидрата, Механизми органских реакција, Методика наставе хемије, Школска пракса). Након избора у звање доцента 2017. године, и касније, након реизбора

у звање доцента за ужу научну област Органска хемија, кандидаткиња је наставила да држи наставу како на основним, тако и на мастер студијама. У текућој 2024/2025. школској години кандидаткиња држи наставу на следећим предметима на основним и мастер студијама хемије: Основи молекулског моделирања, Органометална хемија, Загађујуће материје у животној средини, Методика наставе хемије, Механизми органских реакција, Савремени облици наставе хемије.

2.4. Учешће у комисијама за припрему извештаја за избор у наставничка, сарадничка, и истраживачка звања

Др Светлана Јеремић је више пута била именована за члана Комисије за припрему извештаја за избор пријављених кандидата у одговарајућа наставничка, сарадничка и истраживачка звања, и то:

- Кандидаткиња је један пут била члан Комисије за припрему извештаја за избор пријављених кандидата у звање доцента за ужу научну област Примењена хемија на Агрономском факултету у Чачку (датум одлуке 18.11.2020.г.);
- Један пут је била члан Комисије за припрему извештаја за избор пријављених кандидата у звање асистента са докторатом за научну област Хемија, ужу научну област Физичка хемија у Институту за хемију Природно-математичког факултета у Крагујевцу (датум одлуке 12.05.2021.г.);
- Једном је била члан Комисије за припрему извештаја за избор пријављених кандидата у звање асистента за научну област Хемија, за ужу научну област Физичка хемија (датум одлуке 28.09.2022.г.), у Институту за хемију Природно-математичког факултета у Крагујевцу;
- Једном је била члан Комисије за припрему извештаја за избор пријављених кандидата у звање асистента за научну област Хемија, за ужу научну област Настава хемије (датум одлуке 28.06.2023.г.), у Институту за хемију Природно-математичког факултета у Крагујевцу;
- Кандидаткиња је један пут била члан Комисије за припрему извештаја за избор пријављених кандидата у звање сарадника у настави за научну област Хемија на Државном универзитету у Новом Пазару (датум одлуке 30.10.202.г.);
- Један пут је била члан Комисије за припрему извештаја за избор кандидата Марка Антонијевића у звање истраживач сарадник на Институту за информационе технологије Универзитета у Крагујевцу (датум одлуке 20.09.2022.г.).

2.5. Међународна сарадња

Др Светлана Јеремић је до сада учествовала у реализацији више међународних пројеката, и то три билатерална пројекта, једног TEMPUS, и једног Erasmus+ пројекта. Током реализације поменутих пројеката, кандидаткиња је остварила врло активну сарадњу са истраживачима са следећих институција у иностранству, а што се огледа кроз заједничке публиковане научно истраживачке радове и учешће на пројектима: Факултет

агробиотехничких знаности Осиек (сарадња остварена кроз реализацију билатералног пројекта Србија-Хрватска бр. 69-00-74/2010-02/01; заједничким радом публиковано пет радова категорија М20 и већи број конференцијских саопштења), Институт Руђер Бошковић у Загребу (сарадња остварена кроз реализацију билатералног пројекта Србија-Хрватска бр. 69-00-74/2010-02/01, заједничким радом публиковано шест конференцијских саопштења), Faculty of Chemistry and Chemical Technology, University of Maribor (билатерална сарадња, пројекат бр. 337-00-110/2023-05/3), Faculté de Pharmacie, Limoges, France (билатерална сарадња, пројекат бр. 451-03-3455/2013-09/17), Institute of Research and Development, Duy Tan University, Danang, Vietnam (две публикације категорије М20).

2.6. Организација научних скупова

Др Светлана Јеремић је 2023. године у својству члана међународног организационог одбора Друге међународне конференције за хемо и биоинформатику (2nd International Conference on Chemo and BioInformatics, 28th – 29th September 2023, Kragujevac, Serbia), учествовала у организацији поменуте конференције. Како је један од коорганизатора конференције био и Државни универзитет у Новом Пазару, на ком је кандидаткиња запослена почев од 2010. године, Светлана Јеремић је у организацији конференције учествовала испред своје матичне наставно-научне институције.

<https://www.iccbikg2023.com/international-organazing-committee>

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 технолошки развоја и другим телима везаних за научну делатност; руковођење научним институтцијама)

3.1. Руковођење пројектима, потпројектима и задацима

Кандидаткиња др Светлана Јеремић је у оквиру реализације националног пројекта бр. 174028 „Методe моделирања на више скала са применама у биомедицини“ руководила потпројектним активностима које су се односиле на моделирање структуре биолошки важних једињења са посебним освртом на једињења антрахинонског типа, а са циљем испитивања њиховог антирадикалског капацитета. Резултат ових активности су публиковани у поглављу тематског зборника водећег међународног значаја категорије М13, затим у једном раду категорије М21, затим у четири рада категорије М22, у седам радова категорије М23, као и у бројним конференцијским саопштењима.

3.2. Руковођење научним и стручним друштвима

Др Светлана Јеремић је на Оснивачкој скупштини Подружнице Српског Хемијског Друштва Нови Пазар, одржаној 18. маја 2024. године на Државном универзитету у Новом Пазару, именована за Председника наставне секције ове подружнице.

<https://www.shd.org.rs/podruznice/novi-pazar/>

4. Квалитет научних резултата

(Утицајност; параметри квалитета часописа и позитивна цитираност кандидатских 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 радова

Др Светлана Јеремић је у свом досадашњем научно-истраживачком раду публиковала једно поглавље у тематском зборнику водећег међународног значаја (категирија М13), 33 научна рада SCI листе, категорије М20, један рад у часопису од националног значаја категорије М53 и велики број конгресних саопштења, категорија М30 и М60. Од избора у звање научни сарадник, кандидаткиња је објавила 13 научних радова, од тога 2 у часописима у категорији М21, 6 радова у часописима категорије М22 и 5 радова у часописима категорије М23. Укупан збир импакт фактора свих до сада публикованих радова кандидаткиње је $\Sigma IF_{\text{укупно}} = 62,076$, што подељено са бројем радова износи просечно **1,881** по раду. Од претходног избора у звање збир импакт фактора је $\Sigma IF = 35,562$, што подељено са бројем радова (13) износи просечно **2,74** по раду.

4.2. Цитираност радова

На основу базе података *Scopus*, укупан број цитата научних радова које је кандидаткиња публиковала износи **522** (09.12.2024.г), након изузимања аутоцитата број цитата је **475**, а након изузимања аутоцитата свих коаутора тај број је **342**. Број цитата научних радова које је кандидаткиња публиковала након избора у звање научни сарадник без аутоцитата свих аутора износи **87**. Хиршов индекс *h* износи **16**, док је хетероцитатни *h* индекс **14** (без аутоцитата), а хетероцитатни *h* без аутоцитата свих коаутор износи **12**. Најцитиранији рад кандидаткиње публикован након избора у звање научни сарадник је рад под називом „Selected anthraquinones as potential free radical scavengers and P-glycoprotein inhibitors“, чији је први аутор Светлана Јеремић, и који је публикован 2018. године у часопису *Organic and Biomolecular Chemistry* (<https://doi.org/10.1039/C8OB00060C>), и који је без аутоцитата свих коаутора цитиран 25 пута. Највећи број цитата без аутоцитата свих аутора гледајући све радове кандидаткиње има рад чији је назив „Free radical scavenging potency of dihydroxybenzoic acids“ који је 2017. године публикован у часопису *Journal of Chemistry* (<https://doi.org/10.1155/2017/5936239>) и који има 27 цитата без аутоцитата свих коаутора.

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

Узимајући у обзир да су истраживања др Светлане Јеремић мултидисциплинарног карактера, постоји одређен број научних радова који имају већи број аутора. Сходно томе, а на основу критеријума наведених у Правилнику о поступку и начину вредновања и квантитативном исказивању научноистраживачких резултата, извршено је нормирање радова према броју коаутора. Увидом у број коаутора на радовима кандидата, урађено је нормирање по формули $K/(1+0,2(n-5))$, $n > 5$. Укупан збир нормираних **M** бодова износи **178,89**, док збир нормираних **M** бодова након избора у звање научни сарадник износи **80,50** и нормирањем је умањен је за **8,65** бодова.

4.4. Степен самосталности и степен учешћа у реализацији радова у научним центрима у земљи и иностранству; Допринос кандидата реализацији коауторских радова

Током реализације својих истраживања др Светлана Јеремић је показала висок степен самосталности у научно-истраживачком раду, који се огледа у осмишљавању истраживања, креирању, планирању и реализацији *in silico* експеримената, упоредној анализи резултата добијених експерименталним и теоријским путем, писању и публикавању радова, као и писању пројеката. Потврда томе је једна публикација категорије M13 и осам радова категорија M20 на којима је кандидаткиња први аутор. Сем тога, на овим радовима, као и на више других радова, кандидат је аутор одговоран за кореспонденцију са уредницима и рецензентима научних часописа, што говори у прилог самосталности кандидата у писању научних радова, припреми за слање и одговарању на рецензије. Као један од коаутора на публикованим радовима, било да је први аутор или не, кандидаткиња је била активно укључена у све фазе израде и публикавања резултата, почев од давања идејног решења, преко реализације истраживања, сумирања и анализе резултата, писања, и едитовања текста, до коначног слања рада у часопис и кореспонденције.

4.5. Значај радова

Резултати научно-истраживачког рада кандидата, применом комплементарних истраживачких приступа, доприносе бољем разумевању структурних особина испитиваних једињења, зависности биолошке и хемијске активности једињења од њихове структуре, као и процени њиховог антиоксидативног и инхибиторског капацитета. Истраживачки рад др Светлана Јеремић је усмерен на испитивање механизма антиоксидативне и инхибиторске активности природних и синтетичких једињења применом комбинованих *in silico* метода, као и поређењем резултата добијених теоријским и експерименталним приступом. Тренутна истраживања кандидаткиње обухватају испитивање механизма антиоксидативног деловања природних и синтетичких органских и органометалних једињења на основу термодинамичких и кинетичких показатеља повољности реакције испитиваних једињења. У сврху израчунавања одговарајућих термодинамичких и кинетичких параметара, примењује се методе теорије функционала густине (DFT теорија). Процена инхибиторног капацитета различитих једињења (антиоксиданата и лекова) заснива се на могућностима интеракције испитиваних једињења са протеинима. За испитивања протеин-лиганд интеракција користе се симулације молекулског докинга и молекулске динамике. Узимајући у обзир актуелност истраживања, ови резултати могу значајно допринети бољем разумевању начина деловања неких постојећих биолошки активних молекула, као и развоју нових потенцијалних биолошки активних једињења, и процени могућности њихове употребе у медицини и фармацији.

Кандидаткиња је активно учествовао у креирању и реализацији *in silico* истраживања, обради резултата, дискусији добијених резултата, прикупљању и обради литературе, као и у писању самих радова и одабиру часописа, не само приликом израде

публикација на којима је први и аутор за кореспонденцију, већ и радова на којима је коаутор. Велики број научних радова представљају резултат мултидисциплинарног приступа истраживању, при чему је у реализацији сваког од њих кандидат дао значајан допринос.

VI. ТАБЕЛАРНИ ПРИКАЗ КВАНТИТАТИВНЕ ОЦЕНЕ НАУЧНИХ РЕЗУЛТАТА ЗА СТИЦАЊЕ ПРЕДЛОЖЕНОГ НАУЧНОГ ЗВАЊА

За природно-математичке и медицинске науке

Диференцијални услов – од првог избора у предходно звање до избора у звање	Потребно је да кандидат има најмање 50 поена, који треба да припадају следећим категоријама:	Неопходно	Остварено
Виши научни сарадник	Укупно	50	80,50
Обавезни (1)	M10+M20+M31+M32+M33+M41+M42+M90	40	68,18
Обавезни (2)	M11+M12+M21+M22+M23	30	52,35

V. ЗАКЉУЧАК КОМИСИЈЕ О НАУЧНОМ ДОПРИНОСУ КАНДИДАТА СА ОБРАЗЛОЖЕЊЕМ И ПРЕДЛОГОМ ЗА ОДЛУЧИВАЊЕ

На основу анализе приложене документације и разматрања постигнутих резултата може се закључити да се др Светлана Јеремић успешно бави научно-истраживачким радом и да резултати њеног рада представљају оригиналан научни допринос у области органске хемије и *in silico* истраживања. Успешно влада методологијом истраживања и савременим истраживачким техникама уз изузетан смисао и способност за самостално бављење научно-истраживачким радом и сталну жељу за усавршавањем и стицањем нових знања и компетенција.

На основу детаљног увида у приложену документацију и разматрања постигнутих резултата у научно-истраживачком раду кандидаткиње др Светлане Јеремић, доктора наука – хемијске науке, Комисија закључује да је кандидаткиња објавила једно поглавље у тематском зборнику водећег међународног значаја, затим укупно 33 научна рада у часописима са SCI листе, један рад у часопису националног значаја, и 54 конгресних саопштења. Од избора у звање научни сарадник, кандидаткиња је објавила 13 научних радова у часописима са SCI листе, од тога 2 у часописима категорији M21, 6 радова у часописима категорије M22 и 5 радова у часописима категорије M23. Укупан збир импакт фактора свих до сада публикованих радова

кандидаткиње је $\Sigma IF_{\text{укупно}} = 62,076$, а од претходног избора у звање збир импакт фактора је $\Sigma IF = 35,562$. Укупан збир нормираних М бодова износи **178,89**, док збир нормираних М бодова након избора у звање научни сарадник износи **80,05** што је довољно за избор кандидаткиње у звање виши научни сарадник. Кандидаткиња је до сада учествовала у реализацији три билатерална, једног Tempus, једног Erasmus+ и два национална пројекта. Током израде свих публикованих радова кандидаткиња је показала висок степен самосталности, систематичности, и инвентивности.

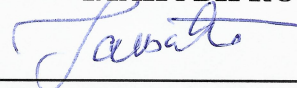
На основу базе података Scopus, укупан број цитата научних радова које је кандидаткиња публиковала износи 522 (09.12.2024.г), а након изузимања аутоцитата свих коаутора тај број је 342. Хиршов индекс h износи 16, док хетероцитатни h индекс без аутоцитата свих коаутора износи 12.

Кандидаткиња је од 01.10.2010. године запослена на Државном универзитету у Новом Пазару, најпре у звању асистента, а од 27.09.2017. и у звању доцента, те стога има и значајно педагошко искуство.

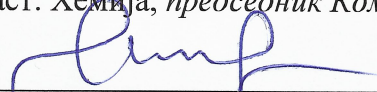
На основу претходно изнетих чињеница, а у складу са Законом о науци и истраживањима („Службени гласник РС”, број 49/19), и сходно Правилнику о стицању истраживачких и научних звања ("Службени гласник РС", број 159 од 30. децембра 2020.г) Комисија закључује да др Светлана Јеремић испуњава све услове за избор у научно звање виши научни сарадник, те предлаже Научном већу Института за хемију, технологију и металургију да прихвати предлог за избор кандидаткиње др Светлане Јеремић у научно звање виши научни сарадник и упути га надлежној комисији Министарства науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије у даљу процедуру.

У Београду,
15. 01. 2025. г.

ЧЛАНОВИ КОМИСИЈЕ:



Др Горан Јањић, научни саветник
Универзитет у Београду,
Институт за хемију, технологију и металургију
Научна област: Хемија, председник Комисије



Др Владимир Панић, научни саветник
Универзитет у Београду
Институт за хемију, технологију и металургију
Научна област: Хемија, члан Комисије



Др Ненад Јанковић, научни саветник
Универзитет у Крагујевцу
Институт за информационе технологије
Научна област: Хемија, члан Комисије