

**Назив института – факултета који подноси захтев:**

Универзитет у Београду -

Институт за хемију, технологију и металургију,

Институт од националног значаја за Републику Србију

Његошева 12, 11000 Београд

**РЕЗИМЕ ИЗВЕШТАЈА О КАНДИДАТУ ЗА СТИЦАЊЕ НАУЧНОГ  
ЗВАЊА ВИШИ НАУЧНИ САРАДНИК**

**I. ОПШТИ ПОДАЦИ О КАНДИДАТУ**

Име и презиме: **Светлана Јерemiћ**

Година рођења: **1981.**

ЈМБГ: **1501981725053**

Назив институције у којој је кандидат стално запослен:

**Државни универзитет у Новом Пазару**

Дипломирала: година: 2006. факултет: **ПМФ Универзитета у Крагујевцу**

Докторирала: година: 2012. факултет: **ПМФ Универзитета у Крагујевцу**

Постојеће научно звање: **Научни сарадник**

Научно звање које се тражи: **Виши научни сарадник**

Област науке у којој се тражи звање: **Природно-математичка**

Грана науке у којој се тражи звање: **Хемија**

Научна дисциплина у којој се тражи звање: **Органска хемија**

Назив научног матичног одбора којем се захтев упућује: **Матични научни одбор за Хемију**

**II. ДАТУМ ИЗБОРА У НАУЧНО ЗВАЊЕ**

Научни сарадник: **27.06. 2018. године**

**III. НАУЧНО -ИСТРАЖИВАЧКИ РЕЗУЛТАТИ (прилог 1 и 2 правилника):**

**Резултати од избора у звање научни сарадник (изражени преко коефицијента М)**

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

	број	вредност	укупно
М11 =			
М12 =			
М13 =	1	7	7

M14 =  
M15 =  
M16 =  
M17 =  
M18 =

2. Радови објављени у научним часописима међународног значаја (M20):

	број	вредност	укупно
M21a =			
M21 =	2	$2 \times 8$	<b>16</b>
M22 =	6	$2 \times 5 + 3 \times 3,57 + 1 \times 2,50$	<b>23,21</b>
M23 =	5	$2 \times 3 + 2 \times 2,50 + 1 \times 2,14$	<b>13,14</b>
M24 =			
M25 =			
M26 =			
M27 =			
M28 =			
M29 =			

3. Зборници са међународних научних скупова (M30):

	број	вредност	укупно
M31 =			
M32 =			
M33 =	9	$8 \times 1 + 1 \times 0,83$	<b>8,83</b>
M34 =	16	$13 \times 0,5 + 3 \times 0,42$	<b>7,76</b>
M35 =			
M36 =			

4. Националне монографије, тематски зборници, лексикографске и картографске публикације националног значаја; научни преводи и критичка издања грађе, библиографске публикације (M40):

	број	вредност	укупно
M41 =			
M42 =			
M43 =			
M44 =			
M45 =			
M46 =			
M47 =			
M48 =			
M49 =			

5. Часописи националног значаја (M50):

	број	вредност	укупно
M51 =			
M52 =			
M53 =			
M54 =			
M55 =			
M56 =			

6. Зборници скупова националног значаја (M60):

	број	вредност	укупно
M61 =			
M62 =			
M63 =	5	$2 \times 1 + 2 \times 0,71 + 1 \times 0,62$	<b>4,04</b>
M64 =	3	$2 \times 0,2 + 1 \times 0,12$	<b>0,52</b>
M65 =			
M66 =			
M67 =			
M68 =			
M69 =			

7. Магистарске и докторске тезе (M70):

	број	вредност	укупно
M71 =			
M72 =			

8. Техничка и развојна решења (M80):

	број	вредност	укупно
M81 =			
M82 =			
M83 =			
M84 =			
M85 =			
M86 =			
M87 =			

9. Патенти (M90):

	број	вредност	укупно
M91 =			
M92 =			
M93 =			
M94 =			
M95 =			
M96 =			
M97 =			
M98 =			
M99 =			

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

	број	вредност	укупно
M101 =			
M102 =			
M103 =			
M104 =			
M105 =			
M106 =			
M107 =			

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

	број	вредност	укупно
M108 =			
M109 =			
M110 =			
M111 =			
M112 =			

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

	број	вредност	укупно
M121 =			
M122 =			
M123 =			
M124 =			
M125 =			

**Укупно M = M10+M20+M30+M60 = 7+52,35+16,59+4,56= 80,50**

#### **IV. КВАЛИТАТИВНА ОЦЕНА НАУЧНОГ ДОПРИНОСА**

##### **1. Показатељи успеха у научном раду:**

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

##### ***Чланство у одборима међународних научних конференција;***

Др Светлана Јеремић је 2023. године била члан међународног организационог одбора Друге међународне конференције за хемо и биоинформатику (2<sup>nd</sup> International Conference on Chemo and BioInformatics, 28th – 29th September 2023, Kragujevac, Serbia), (Прилог 10-01). (<https://www.iccbikg2023.com/international-organazing-committee> )

##### ***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 (Прилог 10-02). Члан је Српског хемијског друштва и председник наставне секције подружнице Нови Пазар (<https://www.shd.org.rs/podruznice/novi-pazar/> ), (Прилог 10-02).

##### ***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 (Прилог 10-03).  
[https://www.mdpi.com/journal/molecules/special\\_issues/40574CVYW2](https://www.mdpi.com/journal/molecules/special_issues/40574CVYW2)

##### ***Рецензије научних радова***

Др Светлана Јеремић је рецензент у великом броју међународних научних часописа, неки од часописа који су затражили стручно мишљење кандидата су: Advanced theory and simulations, Beni-Suef University Journal of Basic and Applied Sciences, Chemistry & biodiversity, Chemistry Select, Computational and theoretical chemistry, Foods, International journal of molecular sciences, Mathematics, Molecular physics, Molecules, Pharmaceuticals, Pharmaceutics, RSC advances, и др. (Прилог 10-04), (<https://orcid.org/0000-0001-5571-6880> ).

## ***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 (Прилог 10-05).

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

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

## ***Допринос развоју науке у земљи***

Др Светлана Јеремић била је ангажована на већем броју међународних и националних пројеката. 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, Прилог 10-06), и пројекта Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије под називом “Методe моделирања на више скала са применама у биомедицини“, којим је руководио проф. др Милош Којић (евиденциони бр. 174028, Прилог 10-06).

Др Светлана Јеремић била је учесник на више билатералних пројеката и других међународних пројеката (Прилог 10-07):

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, 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, 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, члан пројектног тима.

2013-2016: TEMPUS пројекат бр. 544072-2013, Изградња капацитета српског образовања у области пољопривреде (CaSA).

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 свалуације.

### ***Менторство при изради мастер радова***

Др Светлана Јеремић била је ментор при изради следећих мастер радова (Прилог 10-08):

- **Ценана Феризовић**, назив мастер рада: „Теоријска компаративна студија антирадикалске активности 1,2,5-трихидроксиантрахинона и 1,2,5-трихидроксиитиоксанта“, који је одбрањен 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 одбрањен 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 одбрањен 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 (Прилог 10-09):

- **Ценета 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 aethiopsis* L. (Lamiaceae)“, који је одбрањен 12.10.2022. године на Државном универзитету у Новом Пазару;
- **Вилдана Еминовић**, назив мастер рада: „Синтеза и карактеризација мононуклеарног и хетеронуклеарних комплексних једињења Zn(II) са инетрним *terpy*-Cl лигандом“, који је одбрањен 27.02.2023. године на Државном универзитету у Новом Пазару.

### ***Педагошки рад***

Др Светлана Јеремић је запослена на Државном универзитету у Новом Пазару почев од 01.10.2010. године, најпре у звању асистента, затим у звању асистента са докторатом, а тренутно у звању доцента (Прилог 10-08). 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 како на основним тако и на мастер студијама (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). У текућој 2024/2025. школској години кандидаткиња држи наставу на следећим предметима: Основи молекулског моделирања, Органометална хемија, Загађујуће материје у животној средини, Методика наставе хемије, Механизми органских реакција, Савремени облици наставе хемије.



### ***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 (Прилог 10-11). 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.); два пута је била члан Комисије за припрему извештаја за избор пријављених кандидата у звање асистента за научну област Хемија, и то једном за ужу научну област Физичка хемија (датум одлуке 28.09.2022.г.), и једном за ужу научну област Настава хемије (датум одлуке 28.06.2023.г.), оба пута 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.).

### ***Међународна сарадња***

Др Светлана Јеремић је као члан пројектног тима учествовала на три билатерална пројекта, једном TEMPUS пројекту и једном Erasmus+ пројекту (Прилог 10-07). Др Светлана Јеремић има врло активну сарадњу са истраживачима са следећих институција у иностранству, а што се огледа кроз заједничке публиковане научно истраживачке радове и учешће на поменути пројектима: Факултет агроботехничких знаности Осиек (билатерална сарадња, пројекат бр. 69-00-74/2010-02/01, публикације бр. **A-2.2, A-2.10, A-2.13, A-3.9, A-3.19, A-3.20, A-3.23, A-3.24, A-3.25, A-4.2, A-4.5, A-4.7, B-1.4, B-1.10, B-2.3, B-2.4, B-2.6, B-2.8, B-2.9, B-2.10, B-2.11, B-2.12, B-4.8, Прилог 10-13, секције А и Б**), Институт Руђер Бошковић у Загребу (билатерална сарадња, пројекат бр. 69-00-74/2010-02/01, публикације бр. **A-3.25, B-2.3, B-2.6, B-2.8, B-2.11, B-2.12, Прилог 10-13, секције А и Б**), 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 (публикације бр. **A-2.8, A-2.11, Прилог 10-13, секције А и Б**).

### ***Организација научних скупова***

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), (Прилог 10-01).

<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)*

### ***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 (Прилог 10-12). Резултат ових активности су следеће публикације категорија М10 и М20: А-1.1, А-2.2, А-2.10, А-2.11, А-2.12, Б-1.3, Б-1.4, Б-1.5, Б-1.6, Б-1.9, Б-1.10, Б-1.11, Б-1.12, као и бројна конференцијска саопштења.

### **4. Квалитет научних резултата:**

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

### ***Утицајност радова***

Др Светлана Јеремић је у свом досадашњем научно-истраживачком раду публиковала једно поглавље у тематском зборнику водећег међународног значаја (категирија М13, Прилог 10-13 – секција А), 33 научна рада SCI листе, категорије М20, 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 категорији М22 и 5 радова у часописима из 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.

### **Цитираност**

На основу базе података *Scopus*, укупан број цитата научних радова које је публикувао кандидат износи 522 (09.12.2024.г), након изузимања аутоцитата број цитата је 475, а након изузимања аутоцитата свих коаутора тај број је 342. Хиршов индекс *h* износи 16, док је хетероцитатни *h* индекс 14 (без аутоцитата), а хетероцитатни *h* без аутоцитата свих коатор износи 12 (Прилог 10-14). Најцитиранији рад кандидаткиње публикуван након избора у звање научни сарадник је рад А-2.2, публикуван 2018. године, са 25 хетероцитата. Највећи број цитата без аутоцитата свих аутора гледајући све радове кандидаткиње има рад Б-1.3. публикуван 2017. године који има 27 цитата без аутоцитата свих коаутора.

### **Избор 5 најзначајних научних остварења кандидаткиње од избора у научно 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: Биохемија и молекуларна биологија (78/285)

Цитираност (без аутоцитата): 2

Број аутора: 5

Тип рада: нумеричке симулације

Број поена = 8

У овом раду испутивани су механизми антиоксидативне активности природног антрахинона ализарина, за који се зна да има умерени антиоксидативни капацитет. Ализарин има и способност инхибирања фосфорилације ЕРК 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 QTAIM 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: Хемија, Органска хемија (14/59)

Цитираност (без аутоцитата): 25

Број аутора: 4

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 8

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, емолина, алое-емодина и 1,3,8-трихидроксиантрахинона) да деактивирају десет изабраних хидроксилних 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 вредности 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:  $\cdot\text{OH} > (\text{CH}_3)_3\text{C}\cdot\text{O} \approx \cdot\text{OCH}_3 >$

$\text{CCl}_3\text{-O-O}^\bullet > \text{PhO}^\bullet > \text{}^\bullet\text{OOH} \approx \text{CH}_2=\text{CH-O-O}^\bullet \approx \text{CH}_3\text{-O-O}^\bullet \approx \text{CH}_2=\text{CH-CH}_2\text{-O-O}^\bullet \gg \text{O}_2^{\bullet-}$ .  
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  $\text{HOO}^\bullet/\text{O}_2^{\bullet-}$  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

У овом раду проучавана је антирадикалска активност три синтетисана кумаринска деривата, и то су: (*E*)-3-(1-((2-хидроксифенил)амино)етилиден)-2,4-диоксихроман-7-ил ацетат ( $A_1\text{-OH}$ ), затим (*E*)-3-(1-((3-хидроксифенил)амино)етилиден)-2,4-диоксихроман-7-ил ацетат ( $A_2\text{-OH}$ ), и (*E*)-3-(1-((4-хидроксифенил)амино)етилиден)-2,4-диоксихроман-7-ил ацетат ( $A_3\text{-OH}$ ), и њихова способност да деактивирају  $\text{HOO}^\bullet/\text{O}_2^{\bullet-}$  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:  $A_1\text{-OH}$  (58,7%) >  $A_2\text{-OH}$  (57,5%) >  $A_3\text{-OH}$  (53,1%). Анализа кинетичких параметара указала је на то да је *f*-HAT механизам доминантан у инактивацији  $\text{HOO}^\bullet$  радикала. Дефинисан је нови механизам SPL-RAF (енгл. Sequential Proton Loss followed by Radical Adduct Formation) као могући механизам деактивације  $\text{O}_2^{\bullet-}$  радикалске врсте. Активност испитиваних једињења према  $\text{O}_2^{\bullet-}$  радикалу опада у следећем низу:  $A_2\text{-OH}$  ( $1,26 \cdot 10^6 \text{ M}^{-1}\text{s}^{-1}$ ) >  $A_3\text{-OH}$  ( $7,71 \cdot 10^5 \text{ M}^{-1}\text{s}^{-1}$ ) >  $A_1\text{-OH}$  ( $4,22 \cdot 10^5 \text{ M}^{-1}\text{s}^{-1}$ ). Методе молекулског докинга и молекулске динамике примењене су како би се утврдила инхибиторска активност испитиваних молекула према следећим ензимима: липооксигеназа (LOX), миелопероксидаза (MPO), NAD(P)H оксидидаза (NOX), и

ксантин оксидаза (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/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

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  $^{13}\text{C}$  и  $^1\text{H}$  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 молекулског 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: Хемија, Физичка хемија (101/146)

Цитираност (без аутоцитата): 13

Број аутора: 5

Тип рада: нумеричка симулација

Број поена = 3

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.

#### ***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.

#### ***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, анализи резултата, писању и публикавању радова, као и писању пројеката. Потврда томе је једна публикација категорије M13 и осам радова категорија M20 на којима је кандидат 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.

## **Значај радова**

Резултати научно-истраживачког рада кандидата, применом комплементарних истраживачких приступа, допринесе 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. Тренутна истраживања кандидаткиње обухватају испитивање механизма антиоксидативног деловања природних и синтетичкох органских и органометалних једињења на основу термодинамичких и кинетичких показатеља повољности реакције испитиваних једињења. У сврху израчунавања одговарајућих термодинамичких и кинетичких параметара, примењују 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.

## **V. ИСПУЊЕНОСТ УСЛОВА ЗА СТИЦАЊЕ ПРЕДЛОЖЕНОГ НАУЧНОГ ЗВАЊА НА ОСНОВУ КОЕФИЦИЈЕНТА M**

**Критеријуми за избор у научно звање виши научни сарадник  
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
<b>Виши научни сарадник</b>	<b>Укупно</b>	50	<b>80,50</b>
Обавезни (1)	M10+M20+M31+M32+M33+M41+M42+M90	40	<b>68,18</b>
Обавезни (2)	M11+M12+M21+M22+M23	30	<b>52,35</b>

## VI. ОЦЕНА КОМИСИЈЕ О НАУЧНОМ ДОПРИНОСУ КАНДИДАТА СА ОБРАЗЛОЖЕЊЕМ

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* истарживања. 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 након избора у звање научни сарадник објавила укупно 47 библиографских јединица, и то: једно поглавље у тематском зборнику водећег међународног значаја, затим 2 рада у часописима категорији M21, 6 радова у часописима категорије M22 и 5 радова у часописима категорије M23, потом 9 радова на међународним скуповима штампаних у целини (M33), 16 радова радова на међународним скуповима штампаних у изводу (M34), 5 радова на националним скуповима штампаним у целини (M63) и 3 рада на националним скуповима штампаним у изводу (M64). Након избора у звање научни сарадник укупан збир импакт фактора публикованих радова је  $\Sigma IF = 35,562$ , док збир нормираних M бодова након избора у звање 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

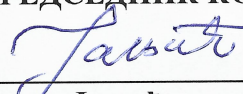
свих коаутора тај број је 342. Хиршов индекс  $h$  износи 16, док хетероцитатни  $h$  индекс без аутоцитата свих коаутора износи 12.

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) може се закључити да је др Светлана Јеремић испунила све услове за избор у научно звање виши научни сарадник. Сходно томе, предлагем 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.

**ПРЕДСЕДНИК КОМИСИЈЕ:**



---

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