Univerzitet u Beogradu
Institut za hemiju, tehnologiju i metalurgiju
Institut od nacionalnog značaja za Republiku Srbiju
Njegoševa 12, Beograd

NAUČNOM VEĆU
Instituta za hemiju, tehnologiju i metalurgiju

Odlukom Naučnog veća Univerziteta u Beogradu - Instituta za hemiju, tehnologiju i metalurgiju (IHTM), Instituta od nacionalnog značaja za Republiku Srbiju od 30. 05. 2025. godine (broj 639/30. 05. 2025.) određeni smo za članove Komisije za podnošenje izveštaja za izbor u zvanje naučni savetnik dr Dragana Popovića, doktora hemijskih nauka, višeg naučnog saradnika Instituta za hemiju, tehnologiju i metalurgiju, Centar za hemiju. Na osnovu priložene dokumentacije o kandidatu, biografskih podataka i pregleda naučno-istraživačkog i stručnog rada, a u skladu sa Zakonom o nauci i istraživanjima („Službeni glasnik RS“ broj 49 od 8. jula 2019.) i Pravilnikom o sticanju istraživačkih i naučnih zvanja („Službeni glasnik RS“, broj 159 od 30. decembra 2020. god. i broj 14 od 20. februara 2023.) i Statutom IHTM, Komisija podnosi Naučnom veću Instituta za hemiju, tehnologiju i metalurgiju sledeći:

I Z V E Š T A J

I BIOGRAFSKI PODACI

Dragan M. Popović rođen je 10.10.1968. god. u Leskovcu, Republika Srbija. Osnovnu i srednju hemijsko-tehnološku školu završio je u Leskovcu sa odličnim uspehom za šta je nagrađen Vukovim diplomama. Prirodno-matematički fakultet Univerziteta u Beogradu upisao je 1988. i diplomirao na istom 1993. sa prosekom ocena 9,78 (student-generacije Hemijskog fakulteta – PMF za školsku 1992/1993. godinu). Diplomski rad pod naslovom: "Analiza ligandnog polja kompleksa prelaznih metala sa N_xO_{6-x} hromoforama" odbranio je na Katedri za neorgansku hemiju Prirodno-matematičkog fakulteta Univerziteta u Beogradu, kao prvi student u svojoj generaciji. U toku studija od 1989. do 1993. god. bio je stipendista Vlade Republike Srbije i farmaceutske kompanije *ICN–Galenika,* a 1994. god. dobio je nagradu Srpskog hemijskog društva za jednog od najboljih studentata koji su 1992/93. god. diplomirali na Hemijskom fakultetu u Beogradu.

Nakon studija u periodu februar 1994. – oktobar 1998. god. radi kao istraživač u Institutu za istraživanje i razvoj, farmaceutske kompanije *Zdravlje* u Leskovcu, na razvoju novih postupaka za sintezu aktivnih supstanci za lekove koje snižavaju visoki krvni pritisak i isuficijenciju srca. Dva YU/RS patenta su proizašla kao rezultat njegovog rada u ovom Institutu, na osnovu kojih je zajedno sa saradnicima razradio tehnološke postupke za sintezu ovih jedinjenja, po kojima su ona proizvođena u industrijskim uslovima i količinama za potrebe *Zdravlja,* a kasnije i *Actavisa* – Leskovac.

Doktorski rad je radio od oktobra 1998. do januara 2002. god. u grupi profesora Ernst-Walter Knapp-a na Slobodnom univerzitetu (Freie Universität) u Berlinu, Nemačka. Doktorsku tezu pod naslovom "Modeling of conformation and redox potentials of hemes and other cofactors in proteins" uspešno je odbranio 15.01.2002. god. sa ocenom "*magna cum laude*". U toku poslediplomskih studija od oktobra 1998. do decembra 2001. god. bio je stipendista projekta "Dynamik und Evolution zellulärer und makromolekularer Prozesse" (GRK 268) Humboldt univerziteta u Berlinu i Deutsche Forschungsgemeinschaft-a (DFG). Nakon doktoriranja je još sedam meseci radio u grupi prof. Knapa kao gostujući istraživač (Gastwissenschaftler). U tom periodu u toku 2002. god. bio je stipendista odseka za Bioinformatiku, Charité univerzitetske klinike u Berlinu, u okviru projekta SFB 498 "Protein-Kofaktor Wechselwirkungen in biologischen Prozessen" finansiranog od strane DFG-a.

U okviru angažovanja u nastavi radio je na Slobodnom univerzitetu Berlin, na Odseku za hemiju. U periodu od 22.10.1999.–30.6.2002. god. obavljao je poslove asistenta na predmetu Teorijska biohemija/Molekulsko modelovanje makromolekulskih sistema i vodio laboratorijski kurs obuke studenata u korišćenju CHARMM programa.

U periodu avgust 2002.–januar 2007. bio je na postdoktorskim studijama na University of California Davis (UCD), u grupi profesora Alexei A. Stuchebrukhov-a, jednog od vodećih svetskih stručnjaka za teorijsku hemiju i procese transfera elektona. U zvanje naučnog saradnika (Reseach Assistant Specialist, step III) na UCD izabran je 01.02.2007. god., gde je ostao da radi do septembra 2012.

U periodu januar 2009.–decembar 2010. god. boravio je na City College-u u Njujorku (CUNY) u grupi profesora Marilyn Gunner, jednog od vodećih eksperata za modelovanje elektostatičkih interakcija u proteinima. Posle doktoriranja je proveo desetak godina radeći na renomiranim američkim univerzitetima.

Zaposlen je od februara 2013. god. na Institutu za hemiju, tehnologiju i metalurgiju – Institutu od nacionalnog značaja za Republiku Srbiju, Univerziteta u Beogradu, prvo kao istraživač-saradnik, a od 25.02.2015. god. kao viši naučni saradnik pri Centaru za hemiju; reizabran je u isto zvanje 31.03.2021. god.

Dr Popović je ekspert za *in silico* molekulsko modelovanje, optimizaciju i simulacije biohemijskih sistema. Posebno se izdvaja njegova ekspertiza u modelovanju elektrostatičkih interakcija u proteinima, pK_a analizi i izračunavanju redoks potencijala kofaktora i kompleksa metala i aktivnih centara enzima. Služi se softverskim programskim paketima: C+, Gaussian, Jaguar, CHARMM, NAMD, Amber, MEAD, MCCE, Karlsberg, Discovery Studio, VMD, WebLab Viewer, RasMol, MDL ISIS Draw, između ostalog. Metode koje koristi u svom istraživačkom radu su: molekulska mehanika, molekulska dinamika, kvantno-mehanički proračuni (*ab initio* i DFT), kontinuum elektrostatički metod, pretraga i analiza proteinske baze podataka i struktura (PDB data mining), bioinformatika, molekulsko modelovanje i sl. Takođe, tokom boravka na Univerzitetu Kalifornija razvio je novu metodu kombinovanih DFT/elektrostatičkih proračuna (nova verzija QM/MM metode) da bi sa

povećanom tačnosću izučavao energetiku procesa u kompleksnim aktivnim centrima enzima, kao što je, binuklearni centar citohrom c oksidaze.

Naučni rad dr Dragana Popovića je iz oblasti teorijsko-računarske hemije, biohemije i biofizike. Usmeren je na proračune i kompjuterske simulacije bioloških makromolekulskih sistema, kao i na molekulsko modelovanje sintetičkih proteina sa ciljanim fizičko-hemijskim osobinama. Dr Popović koristi gore pomenute računarske metode za izračunavanje pK_a vrednosti titratibilnih grupa i oksido-redukcioni potencijal redoks centara u različitim proteinima i enzimima. Izučava energetiku reakcija transfera proton (PT) i transfera elektron (ET), kao i međusobno kuplovanje ET/PT procesa u kompleksnim biohemijskim sistemima. Bioenergetika hemijskih procesa u proteinima i reakcioni mehanizmi u enzimima su u fokusu njegovog istraživanja. Veliki broj radova dr Popovića se bavi membranskim proteinima iz respiratornog elektron-transportnog niza. Citohrom c oksidaza kao molekulska protonska pumpa, koja spreže redukciju O_2 do H_2O u aktivnom mestu enzima sa pumpanjem protona kroz mitohondrijsku membranu nasuprot elektrohemijskom gradientu protona, je jedan od glavnih nerešenih problema u biohemiji i bioenergitici i kao takav neiscrpan izvor novih ideja i radova.

Nakon izbora u zvanje viši naučni saradni, otvorene su nove naučno-istraživačke teme iz biotehnologije i imunologije u saradnji sa prof. Marijom Gavrović-Jankulović. *In silico* dizajnirana himera se *in situ* proizvede genetičkim inžinjeringom kao citosolni protein u *E. coli,* izoluje, karakteriše i ispita njeno imunomodularno dejstvo na životinjama, tkivima ili mikoorganizmima. Ispitivane himere obično sadrže neki protein alergena kao jedan od domena te izazivaju imuno-odgovor organizma, čime mogu da dovedu do korisnih efekata u alergen-specifičnim imunoterapijama uključujući i njihovu farmakološku primenu kao lekova. Nedavno, u saradnji sa grupom dr Gorana Janjića i dr Nemanje Trišovića ispitivan je uticaj različitih tipova F–F interakcija na stabilnost kristalnih struktura malih molekula, uticaj intermolekulskih interakcija na način kristalnog pakovanja, kao i uticaj hiralnosti i intermolekularnih interakcija na molekulsko samoudruživanje i bioprepoznavanje.

Dr Popović je održao veći broj predavanja po pozivu na univerzitetima u inostranstvu i na međunarodnim konferencijama. Kandidat ima uspešnu naučnu saradnju sa nekoliko univerziteta u Evropi i Americi. U toku 2017. god. kao gostujući profesor (visiting professor) je držao nastavu studentima magistrantima i doktorantima na predmetu "Računarske metode u biohemiji" na University of the Philippines Diliman – Quezon City, Metro Manila. Pored toga održao je po pozivu seriju predavanja o modelovanju kompleksnih biohemijskih sistema, prezentujući svoj rad i rezultate, na više univerziteta na Filipinima (UP Manila, UP Diliman, UP Los Banos, Tarlac State University) u okviru World Expert Lecture Series (WELS) programa.

Kao rukovodilac projektnih zadataka dr Dragan Popović učestvovao je na više međunarodnih naučno-istraživačkih projekata, finansiranih od strane NIH (GM 054052), NSF (PHY 0646273), NSF (MCB 1022208), kao i Humboldt Graduate Fellowship (GRK 268) i Charité Research Fellowship (SFB 498) finansiranih od strane DFG-a. Trenutno je učesnik dve COST akcije finansirane od Evropske Unije, CA21101 (COSY) i CA22143 (EuMINe, gde je kao član Upravnog Odbora – predstavnik za Srbiju). Bio je učesnik projekta 02M34PT3 Ministarstva za

nauku i tehnologiju u okviru istraživanje novih metoda za dobijanje i karakterizaciju bioaktivnih molekula. Kandidat je bio angažovan na naučno-istraživačkom projektu koje je finansiralo Ministarstvo prosvete, nauke i tehnološkog razvoja Republike Srbije, broj projekta OI/172035. U poslednjem projektnom periodu je bio angažovan na projektu broj 451-03-136/2025-03/200026 kod našeg Ministarstva.

Autor je **37** naučna rada iz oblasti hemije, biohemije i molekularne biologije, fizičke hemije, biofizike, biotehnologiji, farmacije i organskih sinteza. Od toga, **tri** rada su poglavlja u vodećim međunarodnim naučnim monografijama (**M13**) izdatim od strane renomirnih izdavača - Elsevier i Wiley; **6** rada su poglavlja u međunarodnim naučnim monografijama (**M14**); **4** rada su objavljena u međunarodnim časopisima izuzetnih vrednosti (**M21a**), a **17** u vrhunskim međunarodnim časopisima (**M21**); **tri** u istaknutim međunarodnim časopisima (**M22**); **jedan** u međunarodnom časopisu (**M23**) i **tri** u časopisu nacionalnog značaja (**M53**). Ovi radovi su citirani ukupno 1027 puta, odnosno 847 puta (bez autocitata), u 645 naučnih publikacija, sa ostvarenim Hirsch-ovim indeksom = 16, dok je doktorska teza *download*-ovana više hiljada puta. Takođe, je koautor **dva** YU/RS patenta (**M92**). Kandidat je rezultate svojih istraživanja izložio na velikom broju međunardnih i domaćih naučnih skupova. Koautor je **44** naučnih saopštenja sa međunarodnih naučnih skupova, i **4** saopštenja na skupovima nacionalnog značaja. Pored toga, uređivao je zbornike saopštenja sa **dva** međunarodna naučna skupa održana u Beogradu u okviru COST akcije CA21101 (COSY).

Član je Srpskog i Američkog hemijskog društva. Služi se tečno engleskim i nemačkim jezikom. Gost urednik (Guest Editor) je u međunarodnom naučnom časopisu *Frontiers in Chemistry* (M21/M22 rang, Hemija, multidisciplinarna 55/178, IF_{2022} = 5.5) gde je u toku 2024./25. god. uređivao istraživačku temu: "Exploration of the role of heme proteins in biology with experimental and computational methods". Pored toga, recenzent je u *Journal of Chemical Thermodynamics* (Elsevier; od 2005), *Journal of Physical Chemistry* (ACS; od 2005), *Nano Letters* (ACS; od 2014), kao i u nekoliko časopisa Dove Medical Press izdavača (od 2013). Trentno je aktivni recenzent u *Journal of Biomolecular Structure & Dynamics* (od 2020), kao i u *Essays in Biochemistry* i *Biochemical Society Transactions* (Portland Press; od 2023). Aktivno je učestvovao u izradi i komentorstvu jedne doktorske i jedne magistarske disertacija dva kandidata na UC Davis, SAD. Takodje, 2015. god. je bio član komisije prilikom odbrane master teze jednog kandidata na Hemijskom fakultetu u Beogradu.

II BIBLIOGRAFSKI PODACI

Bibliografija dr Dragana Popovića obuhvata objavljene naučne radove i saopštenja na skupovima u zemlji i inostranstvu u periodu 1999. – 2025. Lista A predstavlja radove nakon prethodnog izbora u zvanje, a lista B predstavlja radove pre prethodnog izbora u zvanje dok je celokupna bibliografija zbir ove dve liste (A+B). Radovi označeni (#) podležu normiranju, a za svaki normirani rad dat je broj koautora i izračunata vrednost. Klasifikacija naučnih rezultata je urađena prema Pravilniku o sticanju istraživačkih i naučnih zvanja („Službeni glasnik RS“, br.

159/2020). Citiranost je data sa i bez autocitata, zaključno sa 27. 05. 2025. godine (spisak radova koji citiraju radove na kojima je kandidat koautor je data u prilogu).

(A) Radovi od prethodnog izbora u zvanje

1. Monografije, monografske studije, tematski zbornici, leksikografske i kartografske publikacije međunarodnog značaja

Od prethodnog izbora: M10 = 25,0

1.1. Monografska studija/poglavlje u knjizi M11 ili rad u tematskom zborniku vodećeg međunarodnog značaja (M13 = 7; 1 × 7 = 7)

1.1.1. Grubišić, S., Đorđević, I., Popović, D.M. (2024). "Optimization of Non-Polarizable and Polarizable Force Fields and Their Application to Model Compounds." In Comprehensive Computational Chemistry (First Edition), Volume 3, pp. 964–986, edited by Manuel Yáñez, Russell J. Boyd. Oxford: Elsevier. [ISBN: 978-0-12-823256-9]
https://doi.org/10.1016/B978-0-12-821978-2.00117-3
Broj autora: 3

1.2. Monografska studija/poglavlje u knjizi M12 ili rad u tematskom zborniku međunarodnog značaja (M14 = 4; 2 × 4 + 4 × 2,5 = 18)

1.2.1. Popović, D.M., Đorđević, I.S. (2022). "Factors determining the orientation of ligated histidines in hemoproteins, cytochromes, and model systems." In Structure and Function of Cytochromes, edited by Elaine J. Mathis, in Biochemistry and Molecular Biology in the Post Genomic Era, 63–126. New York: Nova Science Publishers, Inc. [ISBN: 979-8-88697-102-6 (Hardcover) and ISBN: 979-8-88697-122-4 (eBook)]
Broj autora: 2

1.2.2. Popović, D.M. (2022). "Comparative study on the structure-function correlation of native and synthetic cytochrome b: Protonation and redox properties." In Structure and Function of Cytochromes, edited by Elaine J. Mathis, in Biochemistry and Molecular Biology in the Post Genomic Era, 127–181. New York: Nova Science Publishers, Inc. [ISBN: 979-8-88697-102-6 and ISBN: 979-8-88697-122-4]
Broj autora: 1

1.2.3. Popović, D.M. (2022). "Comparative study of native and synthetic cytochrome b: Modeling, dynamics, and bioinformatics study." In *Structure and Function of Cytochromes*, edited by Elaine J. Mathis, in *Biochemistry and Molecular Biology in the Post Genomic Era*, 183–228. New York: Nova Science Publishers, Inc. [ISBN: 979-8-88697-102-6 and ISBN: 979-8-88697-122-4]
Broj autora: 1

1.2.4. Popović, D.M. (2022). "Redox properties of small synthetic hemoproteins and native enzymes for application in bionanotechnology and bioelectronic devices." In Structure and Function of Cytochromes, edited by Elaine J. Mathis, in Biochemistry and Molecular Biology in the Post Genomic Era, 229–274. New York: Nova Science Publishers, Inc. [ISBN: 979-8-88697-102-6 and ISBN: 979-8-88697-122-4]
Broj autora: 1

1.2.5. Popović, D.M. (2022). "Combined DFT/electrostatics approach: Exploring the coupling of biological electron and proton transfer reactions in cytochrome c oxidase." In Advances in Biology. Volume 2, edited by Charles D. Grant, in Advances in Biology, 1–66. New York: Nova Science Publishers, Inc. [ISBN: 979-8-88697-422-5 (Hardcover) and ISBN: 979-8-88697-435-5 (eBook)]
Broj autora: 1

1.2.6. Popović, D.M. (2023). "The photolyases: Functional and phylogenetic classification, structure-function correlation, and the molecular mechanism for repair of UV-damaged DNA." In Advances in Biology. Volume 3, edited by Charles D. Grant, in Advances in Biology, 1–76. New York: Nova Science Publishers, Inc. [ISBN: 979-8-88697-779-0 (Hardcover) and ISBN: 979-8-88697-846-9 (eBook)]
Broj autora: 1

2. Radovi objavljeni u međunarodnim časopisima; naučna kritika, uređivanje časopisa

Od prethodnog izbora: M20 = 45,34 **Od prethodnog izbora IF = 28,353**

2.2. Radovi u vrhunskom međunarodnom časopisu (M21 = 8; 3×8 + 1 ×6,67 = 30,67)

2.2.1. Mrkić I.V., Minić R.D., Popović D.M., Zivković I.P., Gavrović-Jankulović M.D. Newly designed hemagglutinin-Der p 2 chimera is a potential candidate for allergen specific immunotherapy. *Life Sciences* 213 (2018) 158-165. https://doi.org/10.1016/j.lfs.2018.10.036
IF: 3,448 (2018)
Pharmacology & Pharmacy, 76/267
Citiranost (bez autocitata): 5
Broj autora: 5

2.2.2. Janjić G.V., Jelić S.T., Trisović N.P., Popović D.M., Djordjević I.S., Milčić M.K. New Theoretical Insight into Fluorination and Fluorine-Fluorine Interactions as a Driving Force in Crystal Structures. *Crystal Growth & Design* 20 (2020) 2943-2951.
https://doi.org/10.1021/acs.cgd.9b01565
IF: 4,153 (2018)
Chemistry, Multidisciplinary, 48/172
Citiranost (bez autocitata): 41
Broj autora: 6 (нормирано на 6,67)#

2.2.3. Lopandić, Z., Dragačević, L., Popović, D.M., Andjelković, U., Minić, R., Gavrović-Jankulović, M.D. BanLec-eGFP chimera as a tool for evaluation of lectin binding to high-mannose glycans on microorganisms, *Biomolecules* 11(2) (2021) article number 180, pp 1-13. https://doi.org/10.3390/biom11020180
IF: 6,064 (2021)
Biochemistry & Molecular Biology, 75/297
Citiranost (bez autocitata): 8
Broj autora: 6

2.2.4. Protić-Rosić, I., Lopandić, Z., Popović, D., Blagojević, G., Gavrović-Jankulović, M. rBet v 1a-BanLec$_{wt}$ induce upregulation of IL-10 and IFN-γ gene expression in Caco-2/THP-1 co-culture and secretion of IL-10 and IFN-γ/IL-4 levels in PBMCs of birch pollen allergic donors. *International Immunopharmacology* 129 (2024) 111607.
https://doi.org/10.1016/j.intimp.2024.111607
IF: 5,6 (2022)
Pharmacology & Pharmacy, 44/278
Citiranost (bez autocitata): 1
Broj autora: 6

2.3. Radovi u istaknutom međunarodnom časopisu (M22 = 5; 1 × 5 + 1 × 4,17 = 9,17)

2.3.1. Lazić A.M., Djordjević I.S., Radovanović L.D., Popović D.M., Rogan J.R., Janjić G.V., Trisović N.P. Self-assembly and biorecognition of a spirohydantoin derived from alpha-tetralone: Interplay between chirality and intermolecular interactions. *ChemPlusChem* 85 (2020) 1220-1232. https://doi.org/10.1002/cplu.202000273
IF: 3,441 (2018)
Chemistry, Multidisciplinary, 57/172
Citiranost (bez autocitata): 3
Broj autora: 7

2.3.2. Protić-Rosić, I., Nešić, A., Lukić, I., Miljković, R., Popović, D.M., Atanasković-Marković, M., Stojanović, M., Gavrović-Jankulović, M. Recombinant Bet v 1-BanLec chimera modulates functional characteristics of peritoneal murine macrophages by promoting IL-10 secretion, ***Molecular Immunology*** 138 (2021) 58-67. https://doi.org/10.1016/j.molimm.2021.06.015
IF: 4,407 (2020)
Biochemistry & Molecular Biology, 117/296
Citiranost (bez autocitata): 1
Broj autora: 8 (нормирано на 4,17)#

2.4. Radovi u međunarodnom časopisu (M23 = 3; 1×3 =3,0)

2.4.1. Popović, D. M., Đorđević, I. S. Catalytic center of cytochrome *c* oxidase: Effects of protein environment on p*Ka* values of CuB histidine ligands. *Journal of Serbian Chemical Society* 85 (2020) 1429-1444. https://doi.org/10.2298/JSC200720047P

IF: 1,240 (2020)
Chemistry, Multidisciplinary, 141/178
Citiranost (bez autocitata): 5
Broj autora: 2

2.5. Uređivanje istaknutog međunarodnog naučnog časopisa (gost urednik) ili publikacije sa monografskim delima kategorije M14 (M28b = 2,5, 1×2,5 =2,5)

2.5.1. Popović, D. M. Gost urednik (Guest Editor) u međunarodnom naučnom časopisu *Frontiers in Chemistry* u toku 2024./25. godine (M21/M22 rang, Hemija, multidisciplinarna 55/178, IF_{2022} = 5.5). Uređivao je istraživačku temu: "Exploration of the role of heme proteins in biology with experimental and computational methods". U skladu sa praksom Frontiers časopisa organizovao je sledeće co-editore da mu budu od pomoći: Prof. Chunmao He (South China University of Technology, Guangzhou, China), Prof. Marilyn R. Gunner (City College of New York – CUNY, United States) i Prof. Sergey A. Siletsky (Lomonosov Moscow State University, Russia).

3. Zbornici međunarodnih naučnih skupova (M30)

Od prethodnog izbora: M30 = 1,5 + 3,42 +3,0 = 7,92

3.2. Predavanje po pozivu sa međunarodnog skupa, štampano u izvodu (M32=1,5, 1×1,5 =1,5)

3.2.1. D. Popović, "Protein environment – cofactor interactions in redox protein systems." COST COSY the 1st WG2 virtual meeting "From quantum to classical dynamics of isolated molecules and 3D materials", Belgrade, Serbia, February 6, 2024.

3.4. Radovi saopšteni na skupu međunarodnog značaja, štampani u izvodu (M34 = 0,5; 6×0,5 + 1×0,42 = 3,42)

3.4.1. N.P. Trišović, S.T. Jelić, D.M. Popović, I.S. Đorđević, M.K. Milčić, G.V. Janjić, "The Fluorination as a Driving Force in Crystal Structures." QCrOM2020- Quantum Crystallography Online Meeting, Paris, France, August 26-29, 2020.
(Broj autora 6, нормирано на 0,42)#

3.4.2. D.M. Popović, A. Stuchebrukhov, "DNA Photolyase: Molecular Machinery for Repair of UV-Induced Damage in DNA." 6th Postdoctoral Research Symposium, March 30, 2021, Davis, CA, USA (Web symposium, 2021).

3.4.3. A.M. Lazić, I.S. Đorđević, L.D. Radovanović, D.M. Popović, J.R. Rogan, N.P. Trišović, G.V. Janjić, "Self-discriminating assembly and biorecognition of a spirohydantoin derived from α-tetralone." COST Action Training School (CA21101 COSY) "Multiscale modeling of the

properties of compounds: From isolated molecules to 3D materials relevant for industrial and astrophysical applications", Belgrade, Serbia, September 19-22, 2023.

3.4.4. D.M. Popović, I.S. Đordević, "DFT/solvation continuum electrostatic calculations of proton pumping in mammalian cytochrome *c* oxidase." COST Action Training School (CA21101 COSY) "Multiscale modeling of the properties of compounds: From isolated molecules to 3D materials relevant for industrial and astrophysical applications", Belgrade, Serbia, September 19-22, 2023.

3.4.5. I.S. Đordević, D.M. Popović, "Energetics and kinetics of steps in proton pumping mechanism of mammalian cytochrome *c* oxidase." COST Action Training School (CA21101 COSY) "Multiscale modeling of the properties of compounds: From isolated molecules to 3D materials relevant for industrial and astrophysical applications", Belgrade, Serbia, September 19-22, 2023.

3.4.6. I. Protić-Rosić, Z. Lopandić, D. Popović, G. Blagojević, M. Gavrović-Jankulović, "Evaluation of the immunomodulatory potential of chimera Bv1a-BLwt and its mutants on the co-culture model system." Serbian Biochemical Society 12th Conference International scientific meeting "Biochemistry in Biotechnology", September 21-23, 2023, Belgrade, Serbia.

3.4.7. D. Popović, "Redox properties of novel synthetic hemoproteins and native enzymes for application in biosensors", COST EuMINe 1st General Meeting & Workshop "Data-driven technologies, AI and digitalisation for advanced materials development", Bologna, Italy, April 10-12, 2024.

3.6. Uređivanje zbornika radova sa međunarodnog naučnog skupa (M36 = 1,5; 2×1,5 = 3,0)

3.6.1. Ivana S. Đorđević & Dragan M. Popović. The Training School of COST action CA21101 COSY "Multiscale modeling of the properties of compounds: From isolated molecules to 3D materials relevant for industrial and astrophysical applications", 19–22 September 2023, Belgrade, Serbia. Uređivanje zbornika saopštenja – Book of Abstracts (*August - September 2023*). Pored toga član lokalnog organizacionog komiteta ovog skupa.

3.6.2. Ivana S. Đorđević & Dragan M. Popović. The 1st Virtual meeting WG2 of COST action CA21101 COSY "From quantum to classical dynamics of isolated molecules and 3D materials", 6th February 2024, Belgrade, Serbia. Uređivanje zbornika saopštenja – Book of Abstracts (*January - February 2024*). Pored toga član lokalnog organizacionog komiteta ovog skupa.

5. Radovi u časopisima nacionalnog značaja

Od prethodnog izbora: M50 = 2,0

5.3. Rad u časopisu nacionalnog značaja (M53 = 1,0; 2 × 1 = 2,0)

5.3.1.* Popović, D.M. Iz sajber prostora - Nobelova nagrada za hemiju 2013. Nobel Prize 2013 for Chemistry from the Cyber Space. *Hemijski Pregled* god. 54, br. 6 (2013) 142-147.

[*Kasnili su sa tom sveskom iz finansijskih i tehničkih razloga; štampano posle sednice Naučnog veća tako da ovaj rad nije bio uključen u bodovanje za izbor u zvanje višeg naučnog saradnika. Vidi pismo urednika časopisa Prof. dr Ratka Jankova u prilogu]

5.3.2. Popović, D.M. Fotoliaza – Molekulski mehanizam opravke UV-indukovanih DNK lezija. *Hemijski Pregled* god. 62, br. 3 (2021) 50-62.

6. Predavanja po pozivu na skupovima nacionalnog značaja (M60)

Od prethodnog izbora: M60 = 1,0 + 0,2 = 1,2

6.3. Saopštenje sa skupa nacionalnog značaja štampano u celini (M63 = 1,0; 1 × 1,0 = 1,0)

6.3.1. D. M. Popović, I. O. Juranić. Influence of protein environment on redox properties of cofactors: Redox potentials of artificial cytochrome b, Proceedings of the 52nd Meeting of the Serbian Chemical Society, Novi Sad, Serbia, May 29 and 30. Saopštenje štampano u celosti. (2015) Theoretical Chemistry (TH O1) pp. 96-100.

6.4. Saopštenje sa skupa nacionalnog značaja štampano u izvodu (M64 = 0,2; 1 × 0,2 = 0,2)

6.4.1. Lazić, A.M., Đorđević, I.S., Radovanović, L.D., Popović, D.M., Rogan, J.R., Janjić, G.V., Trišović, N.P., "Uloga intermolekulskih interakcija u supramolekulskoj organizaciji i biološkom prepoznavanju derivata spirohidantoina", 57. savetovanje Srpskog hemijskog društva, Kragujevac 18-19. juni 2021.

Ukupno od izbora (A lista)

ΣM = M13+ M14 + M21 + M22 + M23 + M28b + M32 + M34 + M36 + M53 + M63 + M64 = 81,46

Ukupan IF od izbora = 28,353

(B) Radovi pre prethodnog izbora u zvanje viši naučni saradnik

1. Monografska studija/poglavlje u knjizi M11 ili rad u tematskom zborniku vodećeg međunarodnog značaja (M13 = 7)

Ukupno: M13 = 2 × 7 = 14,0

1.1.1. Popović, D.M., Quenneville, J., Stuchebrukhov, A.A. (2006). "Combined DFT and Electrostatic Calculations of pKa's in proteins: Study of Cytochrome *c* Oxidase." In Modern Methods for Theoretical Physical Chemistry of Biopolymers, Chapter 3: 53–78. Eds.: E.B. Starikow, J.P. Lewis, S. Tanaka. Amsterdam, Netherlands: Elsevier.[ISBN: 978-0-444-52220-7]. https://doi.org/10.1016/B978-044452220-7/50067-8

1.1.2. Quenneville, J., Popović, D.M., Stuchebrukhov, A.A. (2009). "Combined Density Functional Theory (DFT) and Electrostatics Study of the Proton Pumping Mechanism in Cytochrome c Oxidase." In Computational Inorganic and Bioinorganic Chemistry, 353–362. Eds. E.I. Solomon, R. A. Scott, R. B King, [ISBN: 978-0-470-69997-3]. Part of the "Encyclopedia of Inorganic Chemistry" (EIC), New York: John Wiley & Sons, Ltd. [ISBN: 978-0-470-86078-6 & ISBN: 978-0-470-86210-0] https://doi.org/10.1002/0470862106.ia629
This chapter is also available as a part of the "Encyclopedia of Inorganic and Bioinorganic Chemistry" (EIBC), 5-Volume Set (published in 2011). [ISBN: 978-1-119-95143-8] https://doi.org/10.1002/9781119951438.eibc0392 .

2. Radovi objavljeni u međunarodnim časopisima; naučna kritika, uređivanje časopisa

Ukupno: M20 = 149,0 **Ukupno IF= 80,568**

2.1. Radovi u međunarodnom časopisu izuzetnih vrednosti (M21a = 10; 4×10 =40,0)

2.1.1. Zarić, S.D., Popović, D.M., Knapp, E.W. Metal ligand aromatic cation-π interactions in metalloproteins: Ligands coordinated to metal interact with aromatic residues. *Chemistry - A European Journal* 6 (2000) 3935-3942.
https://doi.org/10.1002/1521-3765(20001103)6:21<3935::AID-CHEM3935>3.0.CO;2-J
IF: 5,153 (1998)
Chemistry, Multidisciplinary 7/126
Citiranost (bez autocitata): 134
Broj autora: 3

2.1.2. Popović, D.M., Zarić, S.D., Rabenstein, B. & Knapp, E.W. Artificial cytochrome *b*: Computer modeling and evaluation of redox potentials. *Journal of the American Chemical Society* 123 (2001) 6040-6053. https://doi.org/10.1021/ja003878z
IF: 6,079 (2001)
Chemistry, Multidisciplinary 5/118
Citiranost (bez autocitata): 34
Broj autora: 3

2.1.3. Popović, D.M., Zmirić, A., Zarić, S.D. & Knapp, E.W. Energetics of radical transfer in DNA photolyase. *Journal of the American Chemical Society* 124 (2002) 3775-3782. https://doi.org/10.1021/ja016249d
IF: 6,201 (2002)
Chemistry, Multidisciplinary 5/119

Citiranost (bez autocitata): 42
Broj autora: 4

2.1.4. Popović, D.M. & Stuchebrukhov, A.A. Electrostatic study of the proton pumping mechanism in bovine heart cytochrome *c* oxidase. *Journal of the American Chemical Society* 126 (2004) 1858-1871. https://doi.org/10.1021/ja038267w
IF: 6,903 (2004)
Chemistry, Multidisciplinary 6/124
Citiranost (bez autocitata): 101
Broj autora: 2

2.2. Radovi u vrhunskom međunarodnom časopisu (M21 = 8; 13 × 8 =104,0)

2.2.1. Zarić, S.D., Popović, D.M., Knapp, E.W. Factors determining the orientation of axially coordinated imidazoles in heme proteins. *Biochemistry* 40 (2001) 7914-7928. https://doi.org/10.1021/bi010428q
IF: 4,493 (1999)
Biochemistry & Molecular Biology 48/295
Citiranost (bez autocitata): 59
Broj autora: 3

2.2.2. Popović, D.M., Stuchebrukhov, A.A. Proton pumping mechanism and catalytic cycle of cytochrome *c* oxidase: Coulomb pump model with kinetic gating. *FEBS Letters* 566 (2004) 126-130. https://doi.org/10.1016/j.febslet.2004.04.016
IF: 3,912 (2002)
Biophysics 12/65
Citiranost (bez autocitata): 102
Broj autora: 2

2.2.3. Quenneville, J., Popović, D.M., Stuchebrukhov, A.A. Redox-dependent pK_a of Cu_B histidine ligand in cytochrome *c* oxidase. *Journal of Physical Chemistry B* 108 (2004) 18383-18389. https://doi.org/10.1021/jp0467797
IF: 3,834 (2004)
Chemistry, Physical 15/106
Citiranost (bez autocitata): 26
Broj autora: 3

2.2.4. Popović, D.M., Stuchebrukhov, A.A. Proton exit channels in bovine cytochrome *c* oxidase. *Journal of Physical Chemistry B* 109 (2005) 1999-2006. https://doi.org/10.1021/jp0464371
IF: 4,033 (2005)
Chemistry, Physical 14/111
Citiranost (bez autocitata): 47
Broj autora: 2

2.2.5. Popović, D.M., Quenneville, J., Stuchebrukhov, A.A. DFT/electrostatic calculations of pK_a values in cytochrome *c* oxidase. *Journal of Physical Chemistry B* 109 (2005) 3616-3626. https://doi.org/10.1021/jp046535m

IF: 4,033 (2005)
Chemistry, Physical 14/111
Citiranost (bez autocitata): 44
Broj autora: 3

2.2.6. Makhov, D.V., Popović, D.M., Stuchebrukhov, A.A. Improved density functional theory/electrostatic calculation of the His291 protonation state in cytochrome *c* oxidase: Self-consistent charges for solvation energy calculation. *Journal of Physical Chemistry B* 110 (2006) 12162-12166. https://doi.org/10.1021/jp0608630

IF: 4,115 (2006)
Chemistry, Physical 17/108
Citiranost (bez autocitata): 17
Broj autora: 3

2.2.7. Stuchebrukhov, A.A., Popović, D.M. Comment on "acidity of a Cu-bound histidine in the binuclear center of cytochrome *c* oxidase." *Journal of Physical Chemistry B* 110 (2006) 17286-17287. https://doi.org/10.1021/jp057310u

IF: 4,115 (2006)
Chemistry, Physical 17/108
Citiranost (bez autocitata): 6
Broj autora: 2

2.2.8. Quenneville, J., Popović, D.M., Stuchebrukhov, A.A. Combined DFT and electrostatics study of the proton pumping mechanism in cytochrome *c* oxidase. *Biochim. Biophys. Acta-Bioenergetics* 1757 (2006) 1035-1046. https://doi.org/10.1016/j.bbabio.2005.12.003

IF: 4,237 (2006)
Biophysics 9/66
Citiranost (bez autocitata): 54
Broj autora: 3

2.2.9. Medvedev, E.S., Kotelnikov, A.I., Barinov, A.V., Psikha, B.L., Ortega, J.M., Popović, D.M., Stuchebrukhov, A.A. Protein dynamics control of electron transfer in Photosynthetic Reaction Center from *Rps. Sulfoviridis*. *Journal of Physical Chemistry B* 112 (2008) 3208-3216. https://doi.org/10.1021/jp709924w

IF: 4,189 (2008)
Chemistry, Physical 22/113
Citiranost (bez autocitata): 12
Broj autora: 7

2.2.10. Popović, D.M., Leontyev, I.V., Beech, D.G., Stuchebrukhov, A.A. Similarity of cytochrome c oxidases in different organisms. *Proteins: Structure, Function, and Bioinformatics* 78 (2010) 2691-2698. https://doi.org/10.1002/prot.22783

IF: 3,419 (2008)

Biophysics 17/70
Citiranost (bez autocitata): 44
Broj autora: 4

2.2.11. Couch, V., Popović, D., Stuchebrukhov, A. Redox-Coupled Protonation of Respiratory Complex I: The Hydrophilic Domain. *Biophysical Journal* 101 (2011) 431-438. https://doi.org/10.1016/j.bpj.2011.05.068
IF: 4,390 (2009)
Biophysics 10/74
Citiranost (bez autocitata): 4
Broj autora: 3

2.2.12. Popović, D.M., Stuchebrukhov, A.A. Coupled electron and proton transfer reactions during the O→E transition in bovine cytochrome c oxidase. *Biochim. Biophys. Acta-Bioenergetics* 1817 (2012) 506-517. https://doi.org/10.1016/j.bbabio.2011.10.013
IF: 5,132 (2010)
Biophysics 10/73
Citiranost (bez autocitata): 19
Broj autora: 2

2.2.13. Popović, D.M. Current Advances in Research of Cytochrome c Oxidase. *Amino Acids* 45 (2013) 1073–1087. https://doi.org/10.1007/s00726-013-1585-y
IF: 3,914 (2012)
Biochemistry & Molecular Biology 86/290
Citiranost (bez autocitata): 22
Broj autora: 1

2.3. Radovi u istaknutom međunarodnom časopisu (M22 = 5; 1 × 5 =5,0)

2.3.1. Popović, D.M., Stuchebrukhov, A.A. Two conformational states of Glu242 and pK_a's in bovine cytochrome *c* oxidase. *Photochemical & Photobiological Sciences* 5 (2006) 611-620. https://doi.org/10.1039/b600096g
IF: 2,416 (2006)
Chemistry, Physical 36/108
Citiranost (bez autocitata): 16
Broj autora: 2

3. Zbornici međunarodnih naučnih skupova (M30)

3.2. Predavanje po pozivu sa međunarodnog skupa, štampano u izvodu (M32 = 1,5),

Ukupno M32 = 7,5

3.2.1. D. Popović, E.W. Knapp, "Artificial Metallo-Proteins – A Model of Cytochrome *b*." International Workshop 1999: "Theoretical Biophysics", Graduate program "Dynamics and Evolution of Cellular and Macromolecular Processes", Hiddensee, Germany, March 17-19, 1999.

3.2.2. D. Popović, E.W. Knapp, "Modeling Electron-Transfer in Synthetic Metallo-Proteins." Workshop and evaluation of the Graduiertenkolleg (GRK 268) by the German Research Society (DFG), Humboldt University, Berlin, Germany, July 14-15, 1999.

3.2.3. D. Popović, E.W. Knapp, "Energetics of Photoactivation Process in DNA Photolyase." International Workshop 2000, Graduiertenkolleg "Protein-Kofaktor-Wechselwirkungen in biologischen Prozessen", Berlin, Germany, March 10-12, 2000.

3.2.4. D. Popović, A.A. Stuchebrukhov, "Coupled electron transfer: Proton transfer reactions and proton pumping mechanism of cytochrome *c* oxidase." (Phys-221) ACS Symposium in honor of Rudolph Marcus – "Fifty Years of Electron Transfer and RRKM Theories" at 232nd American Chemical Society National Meeting, San Francisco, CA, USA, September 10-14, 2006.

3.2.5. D. Popović, "Proton pumping mechanism of cytochrome c oxidase: Electron-coupled proton transfer reactions." Gordon Research Conference "Protons & Membrane Reactions", Ventura, CA, USA, February 22-27, 2009.

3.3. Saopštenje sa međunarodnog skupa štampano u celini (M33 =1),

Ukupno M32 = 1,0

3.3.1. V. Medaković, S.D. Zarić, D.M. Popović, E.W. Knapp, "Factors determining the orientation of axially coordinated imidazoles in heme model systems and heme-proteins." Editors: S. Ribnikar, S. Anić. Physical Chemistry 2000, Proceedings of the 5th International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry (2000), pp. 339-341, Belgrade, Yugoslavia, Sept. 27-29, 2000.

3.4. Radovi saopšteni na skupu međunarodnog značaja, štampani u izvodu (M34 = 0,5)

Ukupno M34 = 15,0

3.4.1. D. Popović, E.W. Knapp, "Artificial Metallo-Proteins – A Model of Cytochrome *b*." International Workshop 1999: "Theoretical Biophysics", Graduate program "Dynamics and Evolution of Cellular and Macromolecular Processes", Hiddensee, Germany, March 17-19, 1999.

3.4.2. D. Popović, E.W. Knapp, "Modeling Electron-Transfer in Synthetic Metallo-Proteins." (*Poster*) Workshop and evaluation of the Graduiertenkolleg (GRK 268) by the German Research Society (DFG), Humboldt University, Berlin, Germany, July 14-15, 1999.

3.4.3. D. Popović, E.W. Knapp, "Artificial Metallo-Proteins – A Model of Cytochrome *b*." 5th World Congress of Theoretically Oriented Chemists, WATOC-99, London, UK, August 1-6, 1999.

3.4.4. D. Popović, E.W. Knapp, "Electrostatic Calculations of Native and Artificial Cytochrome *b*: Redox Potential Evaluation." International Workshop 2000, Graduiertenkolleg "Protein Kofaktor Wechselwirkungen in biologischen Prozessen", Berlin, Germany, March 10-12, 2000.

3.4.5. D. Popović, E.W. Knapp, "Energetics of Photoactivation Process in DNA Photolyase." International Workshop 2000, Graduiertenkolleg "Protein Kofaktor Wechselwirkungen in biologischen Prozessen", Berlin, Germany, March 10-12, 2000.

3.4.6. M. Milčić, D. Popović, S.D. Zarić, "Novel Type of Intramolecular Interactions: Metal Ligand-Aromatic Cation-π Interactions" 2nd International Conference of the Chemical Societies of the South-Eastern European Countries on Chemical Sciences for Sustainable Development, Halkidiki, Greece, June 6-9, 2000.

3.4.7. P. Vagedes, D. Popović, B. Rabenstein, E.W. Knapp. " Electrostatic Interactions in Proteins: Redox Reactions and Enzyme Catalysis." 3rd European Conference on Computational Chemistry, Budapest, Hungary, September 4-8, 2000.

3.4.8. D. Popović, M. Milčić, S.D. Zarić, "Novel Type of Intramolecular Interactions in Metallo-proteins." 3rd European Conference on Computational Chemistry, Budapest, Hungary, September 4-8, 2000.

3.4.9. S.D. Zarić, D. Popović, E.W. Knapp, "Factors Determining the Orientation of Axially Coordinated Imidazoles in Heme-Proteins." 3rd European Biophysics Conference 2000, München, Germany, September 9-13, 2000.

3.4.10. D. Popović, E.W. Knapp, "Calculating redox potential in native and artificial cytochrome *b*." 3rd European Biophysics Conference 2000, München, Germany, September 9-13, 2000.

3.4.11. D. Winkelmann, D. Popović, E.W. Knapp, "Computer simulations of enzymatic reactions in DNA photolyase." 3rd European Biophysics Conference 2000, München, Germany, September 9-13, 2000.

3.4.12. P. Vagedes, D. Popović, B. Rabenstein, E.W. Knapp. " Electrostatic Interactions in Proteins: Electron and Proton Transfer Reactions and Enzyme Catalysis." International Meeting "Understanding Protein Electrostatics", Huddinge, Sweden, September 15-18, 2000.

3.4.13. B. Rabenstein, D. Popović, E.W. Knapp, "Modeling Electron Transfer in Proteins: Photosynthetic RC and Photolyase." International Workshop "Biophysics and Bioinformatics" – 2001, Berlin, Germany, August 22-25, 2001.

3.4.14. D. Popović, E.W. Knapp, "Electrostatics of Native and Artificial Cytochrome *b*." International Workshop "Biophysics and Bioinformatics" – 2001, Berlin, Germany, August 22-25, 2001.

3.4.15. E. W. Knapp, D. Popović, S.D. Zarić, "Synthetic cytochrome b: Computer modelling and evaluation of redox potentials," 223rd Meeting of American Chemical Society, Orlando, FL, USA, April 7-11, 2002.

3.4.16. D. Popović, X. Zheng, J. Quenneville, A. Stuchebrukhov, "Computer simulations of cytochrome *c* oxidase." 47th Annual Meeting of the Biophysical Society (BPS2003), San Antonio, TX, USA, March 1-5, 2003.

3.4.17. D. Popović, X. Zheng, and A. Stuchebrukhov, "Coupled Electron and Proton Transfer Reactions, Proton Pumps, and Cytochrome *c* Oxidase: A Computational Study." Hawaii Int. Conference, Honolulu, Hawaii, USA, January 15-18, 2004.

3.4.18. D. Popović, A. Stuchebrukhov, "Computational Study of Proton Pumping Mechanism of Bovine Heart Cytochrome *c* Oxidase." 48th Annual Meeting of the Biophysical Society (BPS2004), Baltimore, MD, USA, February 14-18, 2004.

3.4.19. D. Popović, A. Stuchebrukhov, "Computational Studies of Proton Pumping Mechanism of Cytochrome *c* Oxidase." 13th European Bioenergetics Conference (EBEC 2004), Pisa, Italy, August 21-26, 2004.

3.4.20. R. Sugitani, D.M. Popović, A.A. Stuchebrukhov, "Internal cavities, water channels, and water traffic in Cytochrome c Oxidase." Physical Chemistry Division, 232nd American Chemical Society National Meeting, San Francisco, CA, USA, September 10-14, 2006.

3.4.21. D.M. Popović, A.A. Stuchebrukhov, "Coupled electron and proton transfer reactions and proton pumping mechanism of cytochrome c oxidase." Physical Chemistry Division, 232nd American Chemical Society National Meeting, San Francisco, CA, USA, September 10-14, 2006.

3.4.22. D.V. Makhov, D.M. Popović, A.A. Stuchebrukhov, "An efficient procedure for computing redox potentials in QM/MM method." Physical Chemistry Division, 232nd American Chemical Society National Meeting, San Francisco, CA, USA, September 10-14, 2006.

3.4.23. D. M. Popović, A.A. Stuchebrukhov, "Proton Pumping Mechanism of Cytochrome *c* Oxidase: Electron-Coupled Proton Transfer Reactions." Inorganic Division, 232nd American Chemical Society National Meeting, San Francisco, CA, USA, September 10-14, 2006.

3.4.24. A. Stuchebrukhov, D. Popović, "Computational studies of redox-driven proton pump cytochrome c oxidase." Gordon Research Conference – Computational Chemistry "New Computational Tools for 21st Century Chemistry", Mount Holyoke College, South Hadley, MA, USA, July 27 - August 1, 2008.

3.4.25. D. Popović, A. Stuchebrukhov, "Proton pumping mechanism of cytochrome c oxidase: Electron-coupled proton transfer reactions." Gordon Research Conference "Protons & Membrane Reactions", Ventura, CA, USA, February 22-27, 2009.

3.4.26. A. Stuchebrukhov, T. Hayashi, D. Popović, "Coupled electron and proton transfer in complex I and complex IV of the respiratory chain: Insights from computer simulations." 54th Annual Meeting of the Biophysical Society (BPS2010), San Francisco, CA, USA, February 20-24, 2010.

3.4.27. Emile S. Medvedev, Vernon A. Couch, Dragan M. Popović, Alexei A. Stuchebrukhov, "Statistical analysis of experimental data on titration of metal centers in respiratory complex I." 16th European Bioenergetics Conference (EBEC2010), Warsaw, Poland, July 17-22, 2010.

3.4.28. A. Stuchebrukhov, T. Hayashi, D. Popović, "Redox-driven proton translocation." Gordon Research Conference "Electron Donor-Acceptor Interactions," Salve Regina University, Newport, RI, USA, August 5-10, 2012.

3.4.29. D. Popović, "Photoactivation mechanism of DNA photolyase." *Talk*, 8th International Conference of the Chemical Societies of the South-East European Countries (ICOSEC 8), Belgrade, Serbia, June 27-29, 2013. Oral presentation (O 14 BS-CC)

3.4.30. D. Popović, "Energetics of the steps in proton pumping mechanism and preventing of backflow reactions in cytochrome *c* oxidase." *Talk*, 8th International Conference of the Chemical Societies of the South-East European Countries (ICOSEC 8), Belgrade, Serbia, June 27-29, 2013. Oral presentation (O 32 BS-CC)

5. Radovi u časopisima nacionalnog značaja

5.3. Rad u časopisu nacionalnog značaja (M53 = 1,0)

Ukupno M53 = 1,0

5.3.1. Popović, D.M. Citohrom *c* oksidaza – Molekulske proton pumpa i njen reakcioni mehanizam. *Hemijski Pregled* god. 54, br. 3 (2013) 58-66.

6. Predavanja po pozivu na skupovima nacionalnog značaja (M60)

6.4. Saopštenje sa skupa nacionalnog značaja štampano u izvodu (M64 = 0,2)

Ukupno M64 = 0,4

6.4.1. D.M. Popović, S.D. Zarić, S.R. Niketić, "Analiza ligandnog polja metal–N_xO_{6-x} kompleksa." II Konferencija Srpskog kristalografskog društva, Beograd, 1993.

6.4.2. S.D. Zarić, D. Popović, E.W. Knapp, "Faktori koji određuju orijentacije aksijalno koordinovanih imidazola u hemoproteinima", XL savetovanje Srpskog hemijskog društva, Novi Sad, 18-19 januar 2001.

77. Odbranjena doktorska disertacija (M70 = 6)

Ukupno M71 = 6

7.1. Dragan M. Popović, "Modeling of Conformation and Redox Potentials of Hemes and Other Cofactors in Proteins", Doktorska disertacija, Freie Universität, Berlin, 15. Januara 2002. http://webdoc.sub.gwdg.de/ebook/diss/2003/fu-berlin/2002/12/indexe.html (online verzija)

9. Patenti, autorske izložbe, testovi

9.2. Registrovani patent na nacionalnom nivou (M92 = 12)

Ukupno M92 = 24

9.2.1. Stanković, S.; Stojanović, N.; Stojanović, D.; Stanojević, C.; Popović, D. *Procedure For Synthesis Of Atenolol* (ATENOLOL). Application number P-394/98, submitted on 09/07/1998, published on 08/12/2002. Patent number RS 49569 B, issued date 04/10/2007; AD Zdravlje, Center for Research and Development, Vlajkova 199, 16000 Leskovac, Serbia.

9.2.2. Stanković, S.; Stojanović, N.; Stojičić, S.; Mitov, S.; Popović, D. *Procedure For Synthesis Of 1,4-Dihydropyridine Derivatives* (NIFELAT, NITRENDIPIN, NISOLDIPIN). Application number P-250/99, submitted on 06/04/1999, published on 08/12/2002; Patent number RS 49947 B, issued date 09/29/2008; AD Zdravlje, Center for Research and Development, Vlajkova 199, 16000 Leskovac, Serbia.

Ukupno do izbora (B lista): M = M13 +M21a +M21 +M22 + M32 +M33 +... M92 = 217,9
Ukupan IF (B lista) = 80,568

Ukupno A+B: M = 299,36

Ukupan IF (A+B) = 108,921

III ANALIZA RADOVA

Naučno-istraživački rad dr Dragana Popovića spada u oblast teorijsko-računarske hemije, pri čemu su sistemi koje ispituje najčešće biohemijski, a metode biofizičke. Istraživanja dr Popovića usmerena su pre svega na biomakromolekule, proteine, enzime, DNK, komplekse metala, ali i na male organske i neorganske molekule. U svom radu koristi kompjutersko modelovanje, simulacije i proračune da bi istražio širok spektar različitih tema, kao što su:

- bioenergetika proton i elektron transfer procesa u proteinima
- reakcioni mehanizmi u enzimima
- sintetički proteini i himerne strukture
- bioinformatika i pretraga proteinskih i kristalografskih baza podataka
- interakcije kofaktora/supstrata/inhibitora sa proteinskim okruženjem
- membranski proteini, protonske pumpe i respiratorni elektron-transportni niz
- fotoliaze i kriptohromi.

Dr Dragan Popović autor je **37** naučnih publikacija, od kojih su **3** poglavlja u vodećim naučnim monografijama kategorije **M13** (Elsevier i Wiley), **6** poglavlja u istaknutim monografijama kategorije **M14**, **4** rada objavljena u časopisima izuzetnih vrednosti **M21a**, **17** u vrhunskim međunarodnim časopisima kategorije **M21**, **3** u istaknutim međunarodnim časopisima kategorije **M22**, dok je **1** rad u međunarodnom časopisu kategorije **M23** i **3** u časopisu nacionalnog značaja **M53**. Kandidat je takođe koautor **dva** patenta na nacionalnom nivou **M92**. Rezultate svojih istraživanja prezentovao je na **44** međunarodna i **4** domaća naučna skupa, održao je veliki broj predavanja po pozivu na univerzitetima u inostranstvu i na međunarodnim konferencijama.

Nakon izbora u zvanje višeg naučnog saradnika, dr Dragan Popović je objavio **16** naučnih publikacija, od kojih je **jedno** poglavlje u naučnoj monografiji kategorije **M13**, **6** poglavlja u monografijama kategorije **M14**, **4** rada objavljena u časopisima kategorije **M21**, **2** rada u časopisima kategorije **M22**, dok je **1** rad u časopisu kategorije **M23** i **dva** u časopisu nacionalnog značaja **M53**. Održao je **jedno** predavanje po pozivu na međunarodnom skupu štampano u izvodu (**M32**) i prezentovao je **7** saopštenja štampana u izvodu (**M34**), kao i **jedno** saopštenje stampano u celosti (**M63**) i **jedno** u izvodu (**M64**) sa nacionalnog skupa.

Rezultati istraživanja u periodu nakon izbora u zvanje su uglavnom dobijeni primenom metoda računarske hemije u oblasti biohemije, molekularne biologije, biofizike, fizičke hemije i organometalne hemije, ali i u oblasti biotehnologije, imunologije i farmacije, a mogu se podeliti u nekoliko celina. Prvu celinu (**A**) čine radovi u oblasti nekovalentnih interakcija koje su proučavane u kristalnim strukturama malih molekula (iz *Cambridge Structural Database*, CSD), kao i u proteinima i njihovim aktivnim centarima (*Protein Data Bank*, PDB) metodama hemijske informatike i molekulske mehanike, a uz pomoć *ab initio* i DFT proračuna. Druga celina (**B**) bavi se bioenergetskim procesima i istraživanjem mehanizama enzimskih reakcija kombinovanjem kontinuum elektrostatičkog metoda, molekulske dinamike, *ab initio* i DFT proračuna. Treća celina (**C**) bavi se molekulskim modelovanjem sintetičkih proteina i ispitivanjem njihovih fizičkohemijskih osobina. U četvrtoj celini (**D**) su rezultati eksperimentalno-teorijskih studija, koje su povezane sa biotehnologijom proizvodnje imunomodularnih himera i njihovoj primeni u anti-alergenskoj imunoterapiji. Cilj imunoterapije je da kontinuiranom primenom odgovarajućih doza alergena stvorimo toleranciju na alergen koji uzrokuje neprijatne simptome.

A. Rezultati u prvoj grupi odnose se na nekoliko tipova nekovalentnih interakcija koje su u ovim istaživanjima po prvi put prepoznate, definisane i opisane, kao i na proučavanje nekovalentnih interakcija koje su ranije bile poznate. Kombinovanje informatičkog proučavanja podataka iz kristalnih struktura *Kembridž strukturne baze podataka* (CSD) i *Proteinske banke podataka* (PDB) sa *ab initio*, DFT i molekulsko mehanickim proračunima omogućilo je određivanje karakterističnih geometrijskih parametara i energija interakcija.

Fluorovanje jedinjenja uzrokuje povećanje sposobnosti doniranja protona i smanjenje kapaciteta prihvatanja protona od strane grupa u njihovoj blizini. Formiranje F···F nekovalentnih interakcija prati pomeranje elektronske gustine u području F···F kontakta, što stvara novi region sa većom površinom, višim negativnim potencijalom i, samim tim, izraženijom akceptorskom sposobnošću. Novi region takođe ima veću sposobnost da formira višestruke (istovremene) interakcije sa vrstama iz okoline, čime se kompenzuje smanjenje kapacitet prihvatanja grupa u blizini. Ovaj fenomen, opisan u radu M21/**2.2.2.**, objašnjava ne samo obilnost F···F interakcija u kristalnim strukturama, već i veliki broj struktura sa F···O interakcijama. Samo su C−H···F interakcije brojnije od F···F interakcija u kristalnim strukturama, što ukazuje na visok afinitet fluorovanih jedinjenja za nepolarne grupe. U ovom radu je ispitivan uticaj različitih tipova F···F interakcija na stabilnost kristalnih struktura malih molekula i uticaj intermolekulskih interakcija na način kristalnog pakovanja. Rezultati ovog rada su jako dobro citirani u hemijskim, fizičkohemijskim i kristalografskim časopisima.

U radu M22/**2.3.1.:** "Samoudruživanje i bioprepoznavanje spirohidantoina izvedenog iz α-tetralona: Kompromis između kiralnosti i intermolekularnih interakcija" ispitivan je uticaj hiralnosti i intermolekulskih interakcija značajnih za molekulsko samoudruživanje i bioprepoznavanje na način kristalnog pakovanja ovih organskih molekula. Sintetisan je racemski derivat spirohidantoina sa dva aromatična supstituenta, tetralinom i 4-metoksibenzil jedinicom i određena je njegova kristalna struktura. Da bi se definisao odnos između molekulske stereohemije i prostornih načina asocijacije, razvoj kristalnog pakovanja je analiziran kroz kooperativnost intermolekulskih interakcija. Homo i heterohiralni dimerni motivi su stabilizovani intermolekulskim N–H···O, C–H···O, C–H···π interakcijama i paralelnim interakcijama pri velikim pomacima (PILO), čime se formiraju naizmenični dvostruki slojevi. Najveći doprinos ukupnoj stabilizaciji došao je od motiva suprotnih enantiomera povezanih N–H···O vezama (energija interakcije = 13,72 kcal/mol), nakon čega je sledio homohiralni motiv gde su 4-metoksibenzil jedinice omogućavale C–H···π, C–H···O interakcije i PILO (energija interakcije = 11,56 kcal/mol). Broj kontaktnih fragmenata u okruženju tetralinske jedinice bio je veći, ali 4-metoksibenzil jedinica je imala veći doprinos ukupnoj stabilizaciji. Statistička analiza podataka iz Kembridž strukturne baze podataka (CSD) pokazala je da je ovo opšti trend. Jedinjenje je potencijalni inhibitor kinaznih enzima i receptora spregnutih sa antigenskim proteinima. Može se izvući korelacija između studije dokinga i rezultata CSD analize. Zbog veće fleksibilnosti, 4-metoksibenzil jedinica je prilagodljivija za interakcije sa biološkim ciljevima nego tetralinska jedinica.

Faktori koji određuju orijentaciju liganada, pre svega imidazola, aksijano koordinovanih za metalo-porfirine proučavani su u kompleksima metala, hemoproteinima, citohromima i model sistemima u radu M14/**1.2.1.** Rezultati informatičkog proučavanja podataka iz kristalnih struktura proteina analizirani su i intrepretirani molekulsko-mehaničkim proračunima, koristeći CHARMM *force field*. Ovi rezultati su, između ostalog, po prvi put ukazali na nekovalentne interakcije između propionatnih grupa porfirinskog prstena i aksijalno kooordinovanih imidazola, koje imaju uticaja na orijentacije imidazola. Ove interakcije su po svojoj prirodi

uglavnom elektrostatičke prirode i njihova jačina zavisi od protonacionog stanja i orijentacije propionatnih grupa (ispod/iznad ravni porfirina), kao i od izloženosti porfirina spoljnjem medijumu/rastvaraču. Drugi važan zaključak u vezi sa orijentacijom aksijalnog imidazola je taj da je njegova orijentacija u odnosu na porfirinski deo, takođe u manjoj meri zavisna i od međusobnog položaja heliks *backbone*-a i porfirina. Uticaj građenja vodonične veze sa Nδ–H grupom koordinovanog histidina takođe je ispitivan i u većini slučajeva ona nema presudan uticaj na orijentaciju imidazola, već samo na fino podešavanje položaja koordinovanog histidina. Ovaj rad je od interesa u biohemijskim i fizičkohemijskim studijama, jer su orijenatacije imidazola od uticaja na različite fizičkohemijske osobine proteina.

U ovu grupu radova, možemo uključiti i rad M13/**1.1.1.** koji se bavi optimizacijom nepolarizabilnih i polarizabilnih polja sila i njihovom primenom na ispitivana model jedinjenja. Posebna pažnja je ovde posvećena razvoju i primeni parametara konzistentnog polja sila (CFF) za aminopolikarboksilatne i aminske metalne komplekse, kao i vibracijski optimizovanog polja sila (VOFF) koje dozvoljava precizan opis intra- i inter-molekulskih nevezivnih interakcija kod kompleksa teških metala sa penta- i heksa-dentatnim ligandima i osigurava konzistentnost molekulskih i vibracijskih frekvencija. U ovom radu smo takođe pokazali da je metod konzistentnog polja sila (CFF), jedan od najuspješnijih metoda u konformacionoj analizi kompleksa prelaznih metala s ligandima EDTA tipa. Osim toga, može se koristiti, na primer, za opis interakcije aktivnih mesta proteina sa ovim tipom ligandima ili metalnih centara.

B. Kombinovanjem molekulske mehanike, molekulske dinamike, kontinuum elektrostatičkog metoda, *ab initio* i DFT proračuna proučavana je energetika hemijskih reakcija i mehanizam rada enzima na molekulskom nivou. Fokus istraživanja je stavljen na respiratorni elektron-transportni niz, tj. na proteinske komplekse (NADH/ubihinon oksidoreduktaza – kompleks I; citohrom bc1 – kompleks III, M14/**1.2.2.** i **1.2.3.**; citohrom c oksidaza – kompleks IV, M14/**1.2.5. i** M23/**2.4.1.**) koji se nalaze locirani u unutrašnjoj mitohondrijskoj membrani eukariotskih organizama, odnosno plazma membrani kod prokariota. Ovi enzimi koriste energiju egzergonih oksido-redukcionih reakcija transfera elektrona između metalnih centara, da bi pumpali protone iz mitohondrijskog matriksa u inter-membranski prostor, čime se formira elektrohemijski gradijent protona kroz membrane organela. Reč je o pumpanju protona nasuprot elektrohemijskom gradijentu protona, što je endergoni proces. Sprezanjem ova dva procesa ostvaruje se biološka funkcija ovih enzima, a privremeno čuvanje (konzervacija) energije dobivene razgradnjom/oksidacijom molekula unetih hranom ostvaruje se formiranjem gradijenta protona, koji se po potrebi koristiti za sintezu ATP-a, univerzalne energetske monete za sve energetske procese u ćeliji. Za rad ovih enzima je od posebne važnosti pravovremeni i usklađeni redosled koraka u složenom reakcionom mehanizmu, kao i sprezanje odgovarajućih elektron i proton transfer reakcija, kao što smo opisali u preglednom radu M14/**1.2.5.**

Još od otkrića citohrom c oksidaze, njena funkcija kao redoks reakcijom vođene protonske pumpe bila je predmet intenzivnog istraživanja ali i mnogo kontroverzi. Mehanizam hem-bakar

oksidaza je već duže vremena jedna od ključnih tema u bioenergetici, ili generalno u biohemiji. Uprkos činjenici da mehanizam transporta protona još uvek nije u potpunosti razjašnjen na molekulskom nivou, sa ubrzanim progresom u ovom polju istraživanja izučeni su mnogi važni detalji i principi rada ovog enzima i molekulska osnova za kontrolu efikasnosti pumpanja protona.

Citohrom c oksidaza (CcO) je terminalni enzim respiratornog elektron-transportog niza u većini aerobnih organizama. Važnost ovog enzima za ćelije ogleda se u tome što se više od 90% celokupnog biogenog kiseonika procesuira u njemu. CcO katalizuje redukciju O_2 do vode i spreže ovu reakciju sa pumpanjem protona kroz mitohondrijsku membranu, formirajući elektrohemijski gradijent protona, koji se kasnije, po potrebi, koristi u sintezi ATP-a. Tokom katalitičke redukcije O_2, oksido-redukcione promene i promene stanja protonovanja dešavaju se u binuklearnom kompleksu, aktivnom centru enzima. Ovo dalje može izazavati promene u rasporedu vodoničnih veza, reorijentaciju unutrašnjih molekula vode, kao i konformacione promene i promene stanja protonovanja nekih od ključnih amino kiselinskih ostataka u aktivnom centru.

CcO sadrži četri redoks-aktivna metalna centra preko kojih se obavlja prenos elektrona: Cu_A, hem *a*, i binuklearni kompleks koji se sastoji od hema a_3 i Cu_B. U katalitičkom ciklusu, enzim prolazi kroz više faza, koje se razlikuju po redoks stanju i stanju protonovanja metala, liganada i supstrata u binuklearnom kompleksu. Pri tome, transferu svakog od četiri elektrona, potrebnih za potpunu redukciju molekulskog O_2, pridružena je translokacija po dva protona sa unutrašnje (*negativne*) ka spoljašnjoj (*pozitivnoj*) strani membrane, od kojih se jedan koristi za hemijsku redukciju kiseoničnih intermedijera (hemijski ili supstrat proton), a drugi se pumpa preko membrane (vektorski ili pumpani proton). Ovi protoni se dopremaju preko D- i K-kanala, pri čemu se svi protoni za pumpanje transportuju kroz D-kanal.

Na osnovu interpretacija elektrohemijskih rezultata, sve do 2002. godine smatrano je da se svi protoni pumpaju tokom oksidativne faze katalitičkog ciklusa, što se kasnije pokazalo kao netačno. Problem mehanizma, odnosno kako preneti dva cela naelektrisanja (umesto jednog) po jednom elektronu, nije nimalo trivijalan. Dr Dragan Popović je zajedno sa grupom na UC Davis-u svojim radovima značajno doprineo razumevanju molekulskog mehanizma rada citohrom c oksidaze, jer je među prvima demonstrirao da se dva protona pumpaju tokom oksidativne, a preostala dva tokom reduktivne faze katalitičkog ciklusa.

Polazeći od kristalnih struktura proteina, primenom već pomenutih savremenih računarskih metoda izvedeni su detaljni zaključci o mehanizmu reakcija (identifikovani su svi intermedijeri i prelazna stanja) do kojih je nemoguće doći eksperimentalnim putem. Kandidat je razvio novu metodu kombinovanih DFT/elektrostatičkih proračuna (nova verzija QM/MM metode) da bi se sa povećanom tačnošću tretirali kompleksni aktivni centri u proteinima, kao što je, na primer, binuklearni centar citohrom c oksidaze. Kombinovana DFT/elektrostatička metoda sa povećnom tačnošću izračunava razlike u slobodnoj energiji za reakcije transporta protona između dve

protonabilne grupe ili reakcije transfera elektrona između dva redoks-aktivna metalna centra unutar aktivnog mesta u enzimima, što je detaljno opisano i u monografskoj studiji M14/**1.2.5**.

Predloženi "*kinetic gating mechanism*" sugeriše da je Glu242 povezan sa PLS-om i aktivnim mestom (BNC) sa dva odvojena proton-provodna niza koji se razlikuju u brzini prenosa protona, tj. imaju različite konstante brzine transporta. Brži niz (kanal) obezbeđuje protone do PLS-a, dok sporiji niz prenosi hemijske protone do BNC-a. Naglašena razlika u brzinama transporta osigurava da je proton *prelodovan* na PLS grupi pre nego što dođe do elektron transfera do Cu_B centra i protonovanja redukovanog kiseoničnog intermedijera u aktivnom mestu hemijskim protonom. Struktura i dinamika proton-transportnih vodenih nizova sugeriše da je brzina transfera protona sa Glu do His mnogo veća nego između Glu i OH^- u katalitičkom centru, uprkos činjenici da OH^- ligand u BNC-u poseduje veći afinitet prema protonu nego His291 ili PRA_3 tj. PLS. Prema tome kinetički kriterijum, a ne termodinamički, odlučuje u kom će pravcu proton prvo da bude usmeren i prenet. Kao rezultat kinetičke kontrole ovog procesa, stvara se metastabilno intermedijerno stanje sa *prelodovanim* protonom na PLS-u, sa koga će, kasnije, nakon ulaska i vezivanja hemijskog protona za katalitički centar, doći do izbacivanja (pumpanja) protona na *P*-strani membrane.

Glavni donor protona do *proton-loading site*-a (PLS) ili binuklearnog centra (BNC) je Glu242. Usled termalnih flaktuacija proteina, Glu242 može da menja i prelazi iz jedne u drugu svoju stabilnu konformaciju. Kada je u donjoj (*input*) konformaciji, Glu242 je u kontaktu samo sa protonabilnim grupama u D-kanalu. Kada je u gornjoj (*output*) konformaciji, on može formiranjem vodoničnih veza preko molekula vode da uspostavi kontakt ili sa PLS-om ili BNC-om i tako preda proton nekom od njih. Dakle, putem konformacionog *gating*-a Glu242 funkcioniše kao ventil ("*valve model*") koji omogućava vektorski protok protona u jednom pravcu ka *P*-strani i sprečava njihovo vraćanje nazad ka *N*-strani membrane. Ovaj izuzetno važni deo mehanizma citohrom oksidaze detaljno je pručavan u radovima dr Popovića.

Molekulski mehanizam kojim je prenos elektrona povezan sa pumpanjem protona u citohrom oksidazi jedan je od glavnih nerešenih problema u biohemiji. Glavna tačka sporenja je oko prirode i položaja tkz. proton-loading mesta (PLS) u ovom enzimu. Cu_B kompleks ima tri koordinovana histidina, pri čemu su samo His290 i His291 jonizabilne grupe sa istim pKa vrednostima u vodenom rastvoru, ali na osnovu studije M23/**2.4.1.**, očigledno sasvim različitim vrednostima unutar enzima. Ranije je predložen model pumpanja protona sa centralnom ulogom His290, doduše samo na osnovu kristalne strukture. Nedavni proračuni ukazuju da bi His291 ligand Cu_B centra mogao igrati ulogu pumping elementa, pošto njegovo stanje protonacije zavisi od oksidacionog stanja binuklearnog kompleksa (BNC). Ova elektrostatička studija je primenjena da bi se procenila uloga proteinskog okruženja na kiselost ova dva naizgled ekvivalentna histidina. Njihove pKa vrednosti i efekti različitih energetskih termova su procenjeni da bi se otkrila priroda njihovog različitog ponašanja u enzimu. Rezultati ove studije pokazuju da različito mikro-proteinsko okruženje oko ova dva His je odgovorno za ogromnu

razliku u njihovoj kiselosti i objašnjavaju zašto samo His291 može da deprotonuje pri oksidovanja Cu_B centra, dok His290 uvek ostaje protonovan.

Na značaj ovih rezultata u oblasti biohemije, molekularne biologije, biofizike, bioenergetike, uključujući i medicinsku hemiju ukazuje velika citiranost kandidatovih radova kako među eksperimentalistima, tako i među teoretičarima.

C. Radovi u ovoj oblasti odnose se na molekulsko modelovanje sintetičkih proteina sa jednim ili dva hema sličnih citohromu b, ispitivanju stabilnost dobivenih struktura, i proračunima redoks-potencijala hemova i protonacionog stanja titratibilnih ostataka u njima. Rezultati su dobiveni primenom metoda molekulskog modelovanja, postepenom minimizacijom energije generisanih struktura, uz korišćenje molekulske dinamike i kontinuum elektrostatičkih proračuna.

U radovima M14/**1.2.3.** i M14/**1.2.4.** opisan je postupak molekulskog modelovanja, kojim su generisane atomske koordinate za dva tipa sintetičkih proteina, koji su nedavno sintetisani. Oba tipa sintetičkih proteina sastoje se od 4-heliks *bundle*-a sa antiparalelnom strukturom, koji su prikačeni na ciklični dekapeptid kao templat. Jedan sintetički protein (syn1-Cb) sadrži dva hema i strukturalno oponaša centralni katalitički deo prirodnog citohroma b (cyt b), koji je deo respiratornog citohrom bc1 (cyt bc1) kompleksa M14/**1.2.3.** Drugi sintetički protein (syn2-Cb) poseduje kraće α-helikse, koji formiraju vezivni džep u kome je smešten samo jedan hem (M14/**1.2.4.**). Za syn2-Cb tip sintetisano je 400 mutantnih struktura. Kod svih sintetičkih proteina izmeren je redoks-potencijal hemova, ali kristalne strukture nisu dostupne. Zato su strukturni elementi sintetičkih proteina modelovani *from scratch*, koristeći sve poznate strukturne informacije i izbegavajući napregnutost strukture. Stabilnost modelovanih struktura testirana je molekulskom dinamikom i upoređena sa prirodnim cyt b i cyt bc1 kompleksom. Poređenjem RMS devijacija pokazano je da su modelovane strukture, syn1-Cb i syn2-Cb, rigidne i bez tenzija (M14/**1.2.3.**)

Redoks-potencijali hemova su izračunati iz elektrostatičkih energija dobivenih rešavanjem *Poisson-Boltzmann*-ove jednačine (PBE), kako za prirodni tako i za sintetičke proteine (M14/**1.2.2.**). Saglasnost između izračunatih i eksperimentalno izmerenih redoks-potencijala je unutar 20 mV. Zatim je analizirana zavisnost redoks-potencijala hemova od proteinskog okruženja. Rezultati pokazuju da je ukupni pomeraj (*shift*) redoks-potencijala u odnosu na vrednost u vodenom rastvoru, uglavnom usled niskog dielektričnog medijuma unutar proteina, uticaja polarnih grupa proteinskog *backbone*-a (amidnih veza) i jonskih mostova između arginina i propionatnih grupa na hemu. Dok je razlika u redoks-potencijalima među hemovima uzrokovana interakcijama sa hidrofilnim amino kiselinskim ostacima (polarnim ili naelektrisanim) i jonskim mostova formiranim sa propionatnim grupama na hemu.

Po prvi put je uspešno modelovan ceo protein *from the scratch*, što je dalje omogućilo ispitanje njegovih fizičkohemijskih svojstva. U analizi i poređenju sa prirodnim cyt b, korišćen je i informatički pristup proučavanju struktura, kao što su izučavanje geometrije kompleksa bi-

imidazol porfirina, položaj i orijentacija heliksa, orijentacija imidazola u odnosu na porfirinski deo, analiza dužina veza, veličina uglova, torzionih uglova i sl. M14/**1.2.3.** Značaj ovih rezultata je veliki, kako za izračunavanje fizičkohemijskih veličina u proteinima, generalno, tako i za planiranje i modelovanje novih veštačkih i sintetičkih proteina. Zbog minimalističkog pristupa pri njihovom kreiranju, sintetički proteini se često koriste kao modeli ("makete") složenih proteina. Time se omogućava lakše ispitivanje nekih njihovih funkcija i svojstva bez prisustva drugih strukturnih elemenata, koji bi mogli da interferiraju sa dobivenim rezultatima. Sintetički proteini su takođe od sve većeg značaja u bio-nanotehnologiji.

D. U saradnji sa prof. Marijom Gavrović-Jankulović sa Katedre za Biohemiju, Hemijskog fakulteta u Beogradu su otvorene i nove teme iz biotehnologije i imunologije. *In silico* dizajnirane himere su dobivene genetičkim inžinjeringom kao citosolni proteini u *E. coli*. Nakon izolacije i karakterizacije, ispitano je njihovo imunomodularno dejstvo na životinjama, tkivu, ćelijama ili mikroorganizmima. Studirane himere tipično imaju bar jedan domen koji je deo proteina alergena te kao takve izazivaju imuno-odgovor u organizmu, čime mogu da dovedu do korisnih efekata u alergen-specifičnim imunoterapijama uključujući i njihovu farmakološku primenu kao lekova, vakcina i aerosolova.

Model H1sD2 himere, studiran u radu M21/**2.2.1.**, je dizajniran iz kristalne strukture hemaglutinina virusa gripa H1N1 iz 2009. godine i strukture glavnog alergena grinja kućne prašine Der p2. Dobijena H1sD2 himera kodira aminokiselinsku sekvencu koja sadrzi vezivni domen za HA receptor (HA63–291), PGPG linker i Der p2 domen sa 6His-tagom na C-terminalu. U ovoj studiji je dizajnirana, proizvedena i testirana imunogenost H1sD2 himere u vodi na miševima, što je otkrilo potencijal za modulaciju imunološkog odgovora prema Th1 i Treg fenotipu. S takvom himerom, bez upotrebe *adjuvanata*, indukcija Der p2-inherentnog Th2 imunološkog odgovora bila je oslabljena u modelu s miševima. Ovo otkriće ukazuje na to da H1sD2 himera može biti zanimljiv kandidat za primjenu u modulaciji imunološkog odgovora kod alergije na grinje kućne prašine.

Imunomodularna svojstva imaji i himere dizajnirane od alergena polena breze (Bet v 1a ili rBet v 1l) i banana lektina ($BanLec_{WT}$ ili $BanLec_{H84T}$) studirane u radovima M22/**2.3.2.** i M21/**2.2.4.** Glavni rezultat rada M22/**2.3.2.** je da su očuvane antigenske karakteristike Bet v 1 dela himere, zajedno s većim kapacitetom rBet v 1–BanLec himere da potstiče mnogo jači anti-inflamatorni odgovor u makrofagima u poređenju sa samim Bet v 1 proteinom, što implicira da je rBet v 1–BanLec himera vredna testiranja kao potencijalni terapeutik za alergiju izazvanu na polen breze. Cilj našeg daljeg istraživanja bio je da dobijemo potpuni uvid u terapijski potencijal rBet v 1–BanLec himere ili njegova eventualna ograničenja. Da bi se to postiglo potrebna je evaluacija u specifičnim životinjskim modelima ili tkivima gde će biti moguća procena više specifičnih faktora u kontekstu različitih genetskih predispozicija. To istraživanje je diskutovano u radu M21/**2.2.4.**, (vidi 5 najznačajnijih radova u periodu nakon izbora u zvanje).

S druge strane, himera koja je modelovana od banana lektina i zelenog fluorescentnog proteina (BanLec-eGFP), a dobijena korišćenjem tehnologije rekombinantne DNK, ima sasvim drugačiju namenu. Naime, BanLec-eGFP može biti koristan alat za skrining mesta glikozilacije sa visokim sadržajem manoze na različitim mikroorganizmima, te ima potencijalnu primenu u proceni vezivanja lektina za glikane na mikoroorganizmima. (M21/**2.2.3.**). Fluorescentni eGFP protein igra ulogu taga koji fluorescira tako da se vezivanje BanLec na mikroorganizmima moze lako eksperimentalno pratiti.

Doprinos dr Popovića ovim radovima je u kompjuterski generisanom modelovanju 3D-modela: H1sD2, BanLec–eGFP, rBet v 1a–BanLec, rBet v 1l–BanLec$_{H84T}$, rBanLec$_{H84T}$–Bet v 1l himera i njihovih inverata. Himere su dizajnirane *in silico* kombinovanjem naprednih tehnika modelovanja i molekulske mehanike za generisanje atomskih koordinata i optimizaciju njihovih struktura. Ukupan doprinos kolege Popovića ovim radovima može se sumirati kroz molekulsko modelovanje, formalnu analizu struktura i podataka, diskusiju rezultata, korišćenju softvera, 3D-vizualizaciju struktura i pravljenju slika, kao i pisanju delova teksta i editovanju originalnog drafta.

IV ANALIZA IZABRANIH PET NAJZNAČAJNIJIH NAUČNIH OSTVARENjA KANDIDATA OD POSLEDNjEG IZBORA U NAUČNO ZVANjE

1) Popović, D.M. (2023). "The photolyases: Functional and phylogenetic classification, structure-function correlation, and the molecular mechanism for repair of UV-damaged DNA." In Advances in Biology. Volume 3, edited by Charles D. Grant, 1–76. New York: Nova Science Publishers. [ISBN: 979-8-88697-779-0]

Pregledni rad o fotoliazama (samostalni rad kandidata) pruža jednu od najkompletnijih prezentacija na ovu temu koja se može naći u literaturi, baveći se funkcijom i molekulskim mehanizmom rada ovih enzima, koji vrše popravke na oštećenim molekulima DNK. Da bi se održala genetska stabilnost ćelije, evolutivno su razvijeni zaštitni mehanizmi koji se nose sa različitim vrstama oštećenja. Fotoliaza uklanja najčešće defekte DNK izazvane UV zračenjem – ciklobutan pirimidinske dimere (CPD) i (6-4)-fotoprodukte, katalizujući cepanje ciklobutanskog prstena CPD dimera u pirimidinske monomere u retro-Diels-Alderovoj reakciji koju pokreće vidljivo plavo svetlo. CPD oštećenja DNK koja nisu popravljena su visoko citotoksična jer sprečavaju replikaciju i transkripciju DNK, izazivajući mutagene i kancerogene promene u ćeliji na nivou DNK i sinteze odgovarajućih proteina. Rad daje pregled rezultata eksperimentalnih i teorijsko-računarskih studija ističući i doprinos autora boljem razumevanju ovih sistema. Kroz filogenetsku i strukturnu analizu objašnjava blisku povezanost fotoliaza sa kriptohromima (receptorima plave svetlosti). Kriptohromi su uključeni u različite ćelijske procese, uključujući rast i razvoj biljaka zavistan od svetlosti, regulaciju cirkadijalnih ritmova sisara (ciklično

variranje fizioloških funkcija s trajanjem od oko 24 sata kao sto je ciklus budnosti i spavanja; dan/noć), harmonizaciju brojnih funkcija u mnogim važnim organima životinja, magnetorecepciju kod ptica i insekata i vremensku organizaciju različitih organizama. Pored opširnog uvoda u mehanizam fotoreaktivacije i korelacije strukture i funkcije u DNK fotoliazama i kriptohromima, ovo poglavlje nudi odgovore i na nekoliko kontroverznih detalja i pitanja, koja su dugo ostala nerazjašnjena. Imajući sve ovo u vidu, to čini ovaj rad iz mnogo aspekata izuzetnim.

- Samostalni rad dr Dragana Popovića (poglavlje u knjizi M14).

2) Popović, D.M. (2022). "Combined DFT/electrostatics approach: Exploring the coupling of biological electron and proton transfer reactions in cytochrome c oxidase." In Advances in Biology. Volume 2, edited by Charles D. Grant, 1–66. New York: Nova Science Publishers, Inc. [ISBN: 979-8-88697-422-5]

Uključivanje efekata solvatacije u proračune elektronske strukture postao je ključni aspekt računarske hemije, posebno za sisteme gde interakcije sa rastvaračem igraju značajnu ulogu. Baš takav je kompleksan proteinski sistem citohrom c oksidaze (CcO) koji sadrzi četri redoks–aktivna centra i više manjih ili većih šupljina ispunjenih molekulima vode, kao i membranu i vodenu fazu kao spoljni fiziološki medijum sa jonima Na^+ i Cl^-. U publikacija broj 2 su uzeti u obzir svi ovi elementi i analiziran je uticaj solvatacije na DFT proračune elektronske structure kombinovanjem sa kontinuum elektrostatičkim i solvatacionim proračunima. Protein se tretira kao nehomogeni dielektrični sistem, dok membrana i spoljni rastvarač su predstavljeni dielektričnim kontinuumom koji predstavlja dielektrični odgovor rastvarača (ε=80) i membrane (ε=2-4); efekti polarizacije su takođe uključeni. Reč je o izvornoj metodi koju je autor razvio kombinovanjem DFT/elektrostatičkih proračuna. Predstavljena metoda bioenergetskih proračuna primenjena je za ispitivanje energetike bioloških reakcija prenosa elektrona i protona u CcO. Druga biološki relevantna i veoma vredna karakteristika studije odnosi se na tretman unutrašnjih šupljina ispunjenih rastvaračem i efekata koje one proizvode u proteinima, što je često potcenjen problem u većini bio-računarskih studija. Autor je prepoznao važnost ovih efekata na energetiku reakcija prenosa elektrona i protona u CcO i generalno na većinu hemijskih reakcija u aktivnim mestima enzima. Takođe, kombinovanje kvantne mehanike sa molekulskom mehanikom ili solvatacionim elektrostatičkim proračunima nudi poboljšanu tačnost rezultata, kao što smo nedavno ovde demonstrirali.

- Samostalni rad dr Dragana Popovića (poglavlje u knjizi M14).

3) Lopandić, Z., Dragačević, L., **Popović, D.M.**, Andjelković, U., Minić, R., Gavrović-Jankulović, M.D. BanLec-eGFP chimera as a tool for evaluation of lectin binding to high-mannose glycans on microorganisms, *Biomolecules* 11(2) (2021) article number 180, pp 1-13. https://doi.org/10.3390/biom11020180

Fluorescentno obeleženi lektini su korisni alati za *in vivo* i *in vitro* studije strukture i funkcije tkiva i različitih patogena kao što su virusi, bakterije i gljivice. Za procenu glikana sa visokim

sadržajem manoze prisutnih na različitim glikoproteinima, dizajniran je trodimenzionalni model himere iz kristalnih struktura rekombinantnog lektina banane (BanLec) i poboljšanog zelenog fluorescentnog proteina (eGFP) primenom molekulskog modelovanja i molekulske mehanike. Ekspresijom gena u *E. coli*, BanLec-eGFP je proizveden kao rastvorni citosolni protein mase od 42 kDa. Eksperimentalno mu je potvrđena primarna i sekundarna struktura. U FLLSA testu fluorescencije sa monosaharidima (manoza i glukoza), divljim tipom $BanLec_{WT}$ i $BanLec_{H84T}$ mutantom pokazano je konkurentno vezivanje BanLec-eGFP himere za glikane sa visokim sadržajem manoze iz vakcine protiv gripa (Vaxigrip). Pored toga, BanLec-eGFP *construct* je pokazao vezivanje za ostatke manoze na različitim sojevima *Salmonella* u protočnoj citometriji, sa posebno izraženim vezivanjem za klinički soj *Salmonella Typhi*. Pokazali smo da BanLec-eGFP može biti koristan alat za skrining mesta glikozilacije sa visokim sadržajem manoze na različitim mikroorganizmima. Himera koja je sastavljena od lektina banane i zelenog fluorescentnog proteina (BanLec-eGFP) ima primenu u određivanju vezivanja lektina za glikane sa visokim sadržajem manoze na mikoroorganizmima.

- Ukupan doprinos kolege Popovića ovim radovima može se sumirati kroz molekulsko modelovanje, formalnu analizu struktura i podataka, diskusiju rezultata, korišćenju softvera, 3D-vizualizaciju struktura i pravljenju slika, kao i pisanju delova teksta i editovanju originalnog drafta. Rad je objavnjen u časopisu *Biomolecules* koji pripada kategoriji M21 sa visokim impakt faktorom 6.064 (2021).

4) Protić-Rosić, I., Lopandić, Z., **Popović, D.**, Blagojević, G., Gavrović-Jankulović, M. rBet v 1a-BanLecwt induce upregulation of IL-10 and IFN-γ gene expression in Caco-2/THP-1 co-culture and secretion of IL-10 and IFN-γ/IL-4 levels in PBMCs of birch pollen allergic donors. *International Immunopharmacology* 129 (2024) 111607. https://doi.org/10.1016/j.intimp.2024.111607

Novi pristupi imunoterapiji alergenima (AIT) zahtevaju upotrebu efikasnijih i bezbednijih terapija, što se može postići primenom novih jedinjenja za poboljšanu aktivaciju urođenih imuno-ćelija, kao i upotrebom hipoalergenskih oblika alergena. U ovoj studiji istražujemo imunomodulatorne efekte himere rBet v 1a–$BanLec_{WT}$ (rBv1a–BL_{wt}; C_{WT}) sastavljene od glavnog alergena polena breze (Bet v 1a) i lektina banane ($BanLec_{WT}$; BL_{WT}) i dve nove himere, rBv1l–BL_{H84T} (rBet v 1l–$BanLec_{H84T}$; C_1) i rBL_{H84T}–Bv1l (r$BanLec_{H84T}$–Bet v 1l; C_2), obe sastavljene od banana lektina mutanta BL_{H84T} i hipoalergenskog alergena polena breze Bv1l u modelu ko-kulture Caco-2/THP-1 i PBMC krvnih ćelija od donora sa alergijom na polen breze. Svi himerni molekuli C_{WT}, C_1 i C_2 su kreirani *in silico*, a zatim proizvedeni u *E. coli* korišćenjem tehnologije rekombinantne DNK. PCR analiza ekspresije gena u realnom vremenu nakon tretmana jedinjenjem u modelu ko-kulture otkrila je da sve tri himere imaju potencijal da indukuju ekspresiju gena antiinflamatornog citokina IL-10 u Caco-2 ćelijama i ekspresiju gena IFN-g u THP-1 ćelijama. Sendvič ELISA test je otkrio da C_{WT} povećava sekreciju IL-10 i nivoe IFN-/IL-4 kod ćelija donora alergičnih na polen breze, dok su C_1 i C_2 himere bile manje efikasne.

Nalazi studije sugerišu da C_{WT} himeru treba dalje analizirati kao imunomodulator zbog njene potencijalne koristi u AIT terapiji.

- Ukupan doprinos kolege Popovića ovim radovima može se sumirati kroz molekulsko modelovanje, formalnu analizu struktura i podataka, diskusiju rezultata, korišćenju softvera, 3D-vizualizaciju struktura i pravljenju slika, kao i pisanju delova teksta i editovanju originalnog drafta. Rad je objavnjen u časopisu Biomolecules koji pripada kategoriji M21 sa visokim impakt faktorom 5.6 (2022).

U radovima 3 i 4, kandidat dr Popović je dao svoj doprinos u kompjuterski generisanom modelovanju 3D-modela: BanLec–eGFP, rBet v 1a–BanLec, rBet v 1l–$BanLec_{H84T}$, $rBanLec_{H84T}$–Bet v 1l himera i njihovih inverata. Himere su dizajnirane *in silico* kombinovanjem naprednih tehnika modelovanja i molekulske mehanike za generisanje atomskih koordinata i optimizaciju njihovih struktura. Ovo treba razlikovati od "grafičkog" modelovanja koje generalno ne daje željene rezultate. Pored toga, neke strukture su zahtevale poboljšanje dizajna himernih modela što je postignuto korišćenjem naprednih alata za molekulsko modelovanje i tehnike postepene minimizacije energije sistema. Dobijene su relaksirane strukture bez van der Valsovih atomskih preklapanja, dok su tenzije u vezama, uglovima i torzionim uglovima bile potpuno zanemarljive. Odabir linkera odgovarajuće dužine i sekvence između dva himerna domena može značajno da smanji tenzije unutar himerne stukture i poboljša njihovu stabilnost. Dobijene strukture su analizirane i diskutovan je način vezivanja sustrata za aktivna mesta u domenima (primer, mono- i di-manoze za BanLec). Pri sadašnjem stanju tehnike, korišćenje *in silico* modelovanja i računarskih metoda za karakterizaciju stabilnosti i fizičko-hemijskih svojstava sintetičkih proteina i himera je dostiglo takav nivo da je od velike pomoći eksperimentalistima u biotehnologiji i bioinženjeringu da kreiraju svoja istraživanja i eksperimente. Upotreba kompjuterskog modelovanja postala je jako važna, jer se na taj način mogu izbeći nepotrebni troskovi, gubitak vremena i problemi da su dobijeni *construct*-i nestabilni, slabo rastvorni u vodi ili imaju narušena aktivna mesta vezivanja liganada i supstrata, te su kao takvi neupotrebljivi za dalja eksperimentalna i imunološka ispitivanja.

5) **Popović, D.M.** (2022). "Redox properties of small synthetic hemoproteins and native enzymes for application in bionanotechnology and bioelectronic devices." In Structure and Function of Cytochromes, edited by Elaine J. Mathis, in Biochemistry and Molecular Biology in the Post Genomic Era, 229–274. New York: Nova Science Publishers, Inc. [ISBN: 979-8-88697-102-6]

Oblast bionanotehnologije je nedavno pokazala širok spektar primena sa nano-biomaterijalima, a ovi novi hibridni sistemi su pronašli široku upotrebu za senzore, elektron-provodnike, katalizu, prikupljanje, skladištenje ili transdukciju energije i dizajn novih "pametnih" uređaja. Konkretno, integrisani sistemi biomolekuli-nanočestica sastavljeni na visoko provodljivim elektrodama uspešno su iskorišćeni u dizajniranju bioelektrohemijskih uređaja zasnovanih na enzimima. *De novo* proteinski sistemi proučavani u radu broj 5 mogu pronaći primenu u bionanotehnologiji i

bioelektronici kao centralne komponente biosenzora. Stoga je razumevanje njihovih redoks svojstava neophodno za fino podešavanje funkcije takvih biosenzora. U ovom samostalnom radu, dr Popović je koristio pristup molekulskog modelovanja kombinovanjem molekulske mehanike, dinamike i kvantne mehanike za generisanje atomskih koordinata više malih sintetičkih mono-hem proteina. Protonaciono stanje proteina i redoks potencijali hem kofaktora izračunati su iz elektrostatičkih energija. Analiziran je efekat proteinskog okruženja i mutacija na pomeranje redoks potencijala. Izračunati redoks potencijali se generalno dobro slažu sa dostupnim eksperimentalnim merenjima (RMSD $\leq$ 15 mV). Faktori odgovorni za pomeranje redoks potencijala su detaljno analizirani, a koncept predstavljen ovde može otvoriti put za dizajn proteina sa željenim svojstvima prilagođenim specifičnim funkcijama, pružajući nove vredne informacije kako u fundamentalnim, tako i u primenjenim naukama. U ovom radu se takođe razmatraju i neki primeri sintetičkih i prirodnih citohroma koji se koriste kao centralne komponente biosenzora u bioelektronskim/biokatalitičkim primenama.

- Ovo je samostalni rad dr Dragana Popovića (poglavlje u knjizi M14).

V Kvalitativna ocena naučnog doprinosa

1. *Pokazatelji uspeha u naučnom radu:*

(Nagrade i priznanja za naučni rad dodeljene od strane relevantnih naučnih institucija i društava; uvodna predavanja na naučnim konferencijama i druga predavanja po pozivu; članstva u odborima međunarodnih naučnih konferencija; članstva u odborima naučnih društava; članstva u uređivačkim odborima časopisa, uređivanje monografija, recenzije naučnih radova i projekata)

1.1 Nagrade i priznanja za naučni rad

1. Nagrada Srpskog hemijskog društva (SHD) za izuzetan uspeh u toku studiranja na Hemijskom fakultetu-PMF, Univerziteta u Beogradu.

2. Diploma Univerziteta u Beogradu za najboljeg studenta generacije (prosek ocena 9,78) PMF-a u školskoj 1992/93.

3. Stipendija Humboldt univerziteta u Berlinu i Deutsche Forschungsgemeinschaft-a (DFG) za rad na doktorskoj disertaciji u okviru projekta "Dynamik und Evolution zellulärer und makromolekularer Prozesse" Graduirtenkolleg (GRK 268), od Okt. 1998. do Dec 2001. god.

4. Istraživačka stipendija odseka za Bioinformatiku, Charité univerzitetske klinike u Berlinu, u okviru DFG projekta "Protein-Kofaktor Wechselwirkungen in biologischen Prozessen" (SFB 498) u periodu od januara do jula 2002. godine.

5. Promocija u zvanje Research Assistant Specialist, step III (naučni saradnik) na University of California Davis, 01.02.2007. godine. U procesu promocije u zvanje traženo je mišljenje i recenzija od strane sedam vrhunskih naučnika, iz SAD i Evrope, iz naučnih oblasti u kojima Kandidat radi; videti recenzije u Prilogu.

6. U okviru WELS (World Expert Lecture Series) programa, kandidat je u toku 2017./2018. god. pozvan da na više Univerziteta na Filipinima održi seriju predavanja o svom radu na kompleksnim biohemijskim sistemima.

Prilog 3: kopija sertifikata, diplome i nagrade, kopije pisama i dokumenata; kopije recenzija prilikom izbora u zvanje Research Assistant Specialist, step 3/Naučni saradnik; **Prilog 6:** WELS program sertifikati.

1.2 Uvodna predavanja na naučnim konferencijama

Dr Popović je održao više predavanja po pozivu na međunarodnim naučnim konferencijama.

1. Nedavno predavanje po pozivu "Protein environment – cofactor interactions in redox protein systems" (**3.2.1. sa A lista**) 1st WG2 COST-COSY meeting "From quantum to classical dynamics of isolated molecules and 3D materials", održano je 6. February **2024.** u Beogradu.

2. Simpozijum u čast 50-godišnjice od postavljanja Markusove teorije elektron-transfera (za koju je 1992. godine prof. Markus dobio Nobelovu nagradu) održan je na 232nd American Chemical Society National Meeting-u u San Francisku 2006, okupivši najeminentnije naučnike iz te oblasti. Dr Popović je održao predavanje "Coupled electron transfer: Proton transfer reactions and proton pumping mechanism of cytochrome *c* oxidase" (3.2.4. sa B liste) na ovom skupu, čiji je učesnik i predavač bio i sam Rudolph Marcus. Za kompletan program konferencije i listu predavača pogledati prilog. O ovom simpozijumu objavljen je članak u Chemical & Engineering News, a između ostalog posvećen je i prostor predavanju dr Dragana Popovića i istraživanju u grupi prof. Stuchebrukhova, kao dobrom primeru napretka do koga se došlo u razumevanju bioloških sistema koristeći teoriju elektron-transfera.

3. Važno je istaći predavanje "Proton pumping mechanism of cytochrome c oxidase: Electron-coupled proton transfer reactions" (3.2.5. sa B liste) na Gordon Research konferenciji "Protons & Membrane Reactions" u Venturi, Kalifornija, od Februara 22-27, 2009. Konferencija je okupila najeminentnije stučnjake i naučnike iz oblasti protonskih pumpi, jonskog transporta i transporta malih molekula u ćelijama kroz membrane organela, posredstvom proteinskih kompleksa i drugih nosača.

4. Preostala tri predavanja po pozivu (3.2.1., 3.2.2. i 3.2.3. sa B liste) održana su na međunarodnim Workshopovima u organizaciji Deutsche Forschungsgemeinshaft-a (DFG), Graduiertenkollega (GRK 268) i SFB 498, čiji je stipendista bio dr Popović, 2000. i 2001. godine u Berlinu, a 1999. godine na ostrvu Hiddensee u Baltičkom moru (Nemačka).

Prilog 2: Predavanja po pozivu na međunarodnim naučnim skupovima – reference iz kategorije M32 sa A i B liste: kopije pozivnih pisma, programi konferencija i liste predavača; članak u Chemical & Engineering News; M32 predavanje po pozivu 3.2.1. sa lista A i pozivno pismo.

1.3 Druga predavanja po pozivu

Kandidat je održao više predavanja po pozivu na stranim Univerzitetima:

Freie Universität Berlin, Nemačka

Humboldt Universität Berlin, Nemačka

Charité Universitätklinik, Institut za biohemiju, Berlin, Nemačka

University of California, Davis, SAD

City College of New York, SAD

Serija predavanja na univerzitetima na Filipinima (University of Philippines – UP sistem), u toku **2017**. god. u okviru programa World Expert Lecture Series (WELS):

UP Manila, UP Diliman, UP Los Banos i Tarlac State University.

Kao i na domaćim fakultetima i institutima:

Tehnološki fakultet, Leskovac

Hemijski fakultet, Beograd

Institut za multidisciplinarna istraživanja, Beograd

Prilog 4: lista održanih predavanja kao Stipendiste DFG-a i Humboldt Univerziteta; **Prilog 5 i 6:** pozivna pisma i sertifikati o održanim predavanjima po pozivu na stranim univerzitetima.

1.4 Članstvo u uređivačkom odboru časopisa i recenzije naučnih radova

Dr Popović je gost urednik (Guest Editor) u međunarodnom naučnom časopisu *Frontiers in Chemistry* (M21/M22 rang, Hemija, multidisciplinarna 55/178, IF_{2022} 5.5) gde je u toku 2024./25. god. uređivao istraživačku temu: "Exploration of the role of heme proteins in biology with experimental and computational methods".

Kandidat je učestvovao u recenziji velikog broja naučnih radova u časopisima sa ISI SCI liste:

1. *Nano Letters* (M21a rang, Materials Science, Multidisciplinary 9/260), IF_{2014} 13.592

2. *Journal of Physical Chemistry B* (M22 rang, Chemistry, Physical 59/147), IF_{2017} 3.146

3. *Drug Design, Development and Therapy* (Dove Medical Press) više recenzija u periodu 2013. – 2019. god. (M21 rang, Chemistry, Medicinal 17/59) IF_{2014} 3.028; (M22 rang, Chemistry, Medicinal 23/61) IF_{2019} 3.216

4. *Reports in Electrochemistry* (Dove Medical Press) više recenzija 2013., 2015., 2017. i 2018. (M23 rang)

5. *Advances and Applications in Bioinformatics and Chemistry* (Dove Medical Press) više recenzija 2013., 2015., 2017., 2018. i 2019. (M23 rang)

6. *Journal of Biomolecular Structure & Dynamics* (M21/M22 rang, Biophysics 15/72, IF_{2021} 5.235) više od 10 recenzija u period od 2020. do 2025. god.

7. *Essays in Biochemistry* (Portland Press) (M21 rang, Biochemistry & Molecular Biology 53/285), IF_{2022} 6.4 od 2023. god.

8. *Biochemical Society Transactions* (Portland Press) (M22 rang, Biochemistry & Molecular Biology 108/285), IF_{2023} 3.8 od 2024. god.

9. *Frontiers in Chemistry* (M21/M22 rang, Chemistry, Multidisciplinary 55/178, IF_{2022} 5.5) više recenzija u period od 2021. do 2025. god.

Prilog 1. Potvrda o recenziranim radovima; **Prilog 10.** Guest Editor *Frontiers in Chemistry*.

1.5 Članstvo u naučnim organizacijama

Član Srpskog hemijskog društva (SHD) i Američkog hemijskog društva (ACS).

1.6. Članstvo u odborima međunarodnih naučnih konferencija

Bio je član lokalnog organizacionog komiteta dva međunarodna naučna skupa održana u Beogradu u okviru COST akcije CA21101 (COSY). Pored toga, ko-uređivao je zbornike saopštenja sa ova dva međunarodna skupa sa koleginicom dr Ivanom Đorđević –

1. Training School of COST action CA21101 COSY, 19–22 September 2023, Belgrade, Serbia. (M36-1 separati radova - Book of Abstracts, Bibliografija 3.6.1.)

2. 1st Virtual meeting WG2 of COST action CA21101 COSY, 6. February 2024, Belgrade, Serbia. (M36-2 separati radova - Book of Abstracts, Bibliografija 3.6.2.)

2. *Angažovanost u razvoju uslova za naučni rad, obrazovanju i formiranju naučnih kadrova*

(Doprinos razvoju nauke u zemlji; mentorstvo pri izradi master, magistarskih i doktorskih radova, rukovođenje specijalističkim radovima; pedagoški rad; međunarodna saradnja; organizacija naučnih skupova)

2.1 Doprinos razvoju nauke u zemlji

Svojim rezultatima, dr Dragan Popović daje izuzetan doprinos razvoju naučnih oblasti kojima se bavi, kako u Republici Srbiji, tako i na međunarodnom nivou.

Dr Popović je ekspert za *in silico* molekulsko modelovanje, optimizaciju i simulacije biohemijskih sistema. Posebno se izdvaja njegova ekspertiza u modelovanju elektrostatičkih interakcija u proteinima, pK_a analizi i izračunavanju redoks potencijala kofaktora i kompleksa metala. Služi se softverskim programskim paketima: C+, Gaussian, Jaguar, CHARMM, NAMD, Amber, MEAD, MCCE, Karlsberg, Discovery Studio, VMD, WebLab Viewer, RasMol, MDL ISIS Draw, između ostalog. Metode koje koristi u svom istraživačkom radu su: molekulska mehanika, molekulska dinamika, kvantno-mehanički proračuni (*ab initio* i DFT), kontinuum

elektrostatički metod, pretraga i analiza proteinske baze podataka i struktura (PDB data mining), molekulsko modelovanje i sl. Takođe, u saradnji sa prof. Stuchebrukhovim na Univerzitetu Kalifornija, razvio je novu metodu kombinovanih DFT/ elektrostatičkih proračuna (nova verzija QM/MM metode) da bi sa povećanom tačnosću izučavao energetiku procesa u kompleksnim aktivnim centrima enzima, kao što je, binuklearni centar citohrom c oksidaze.

Naučni rad dr Dragana Popovića je iz oblasti teorijsko-računarske hemije, biohemije i biofizike. Usmeren je na proračune i kompjuterske simulacije bioloških makromolekulskih sistema, kao i na molekulsko modelovanje sintetičkih proteina sa ciljanim fizičko-hemijskim osobinama. Dr Popović koristi gore pomenute računarske metode za izračunavanje pK_a vrednosti titratibilnih grupa i oksido-redukcioni potencijal redoks centara u različitim proteinima i enzimima. Izučava energetiku proton transfer (PT) i elektron transfer (ET) reakcija, kao i međusobno kuplovanje ET/PT procesa u kompleksnim biohemijskim sistemima. Bioenergetika hemijskih procesa u proteinima i reakcioni mehanizmi u enzimima su u fokusu njegovog istraživanja. Veliki broj radova dr Popovića se bavi membranskim proteinima iz respiratornog elektron-transportnog niza. Reakcioni mehanizam citohrom c oksidaza kao molekulske protonske pumpe, je jedan od glavnih nerešenih problema u biohemiji i bioenergitici i kao takav neiscrpan izvor novih ideja i radova.

Pored toga su otvorene i nove teme iz biotehnologije i imunologije u saradnji sa prof. Marijom Gavrović-Jankulović sa Katedre za Biohemiju, Hemijskog fakulteta u Beogradu. *In silico* dizajnirana himera se proizvede genetičkim inžinjeringom kao citosolni protein u *E. coli*, izoluje, karakteriše i ispita njeno imunomodularno dejstvo na životinjama, tkivu ili mikroorganizmima. Ispitivane himere obično sadrže neki protein alergena kao jedan od domena te izazivaju imuno-odgovor u organizmu, čime mogu da dovedu do korisnih efekata u alergen-specifičnim imunoterapijama uključujući i njihovu farmakološku primenu kao lekova, vakcina i aerosolova. Tako, model H1sD2 himere je dizajniran iz kristalne strukture hemaglutinina virusa gripa H1N1 iz 2009. godine i strukture glavnog alergena grinja kućne prašine Der p2. Dobijena H1sD2 himera kodira aminokiselinsku sekvencu koja sadrzi vezivni domen za HA receptor (HA63–291), PGPG linker i Der p2 domen sa 6His-tagom na C-terminalu. Imunomodularne su i himere sastavljene od alergena polena breze (Bet v 1a ili rBet v 1l) i banana lektina ($BanLec_{WT}$ ili $BanLec_{H84T}$). S druge strane, himera koja je sastavljena od banana lektina i zelenog fluorescentnog proteina (BanLec-eGFP) ima potencijalnu primenu u proceni vezivanja lektina za glikane sa visokim sadržajem manoze na mikoroorganizmima. BanLec-eGFP može biti koristan alat za skrining mesta glikozilacije sa visokim sadržajem manoze na različitim mikroorganizmima. (Vidi radove 2.2.1., 2.2.3., 2.2.4., i 2.3.2. sa A liste).

Nedavno, u saradnji sa grupom dr Gorana Janjića i dr Nemanje Trišovića ispitivan je uticaj različitih tipova F–F interakcija na stabilnost kristalnih struktura malih molekula, uticaj intermolekulskih interakcija na način kristalnog pakovanja, kao i uticaj hiralnosti i intermolekularnih interakcija značajnih za molekulsko samo-udruživanje i bioprepoznavanje (radovi 2.2.2. i 2.3.1 sa A liste).

Na osnovu patenata RS 49569 i RS 49947 (9.2.1. i 9.2.2. sa B liste), kandidat Dr. Popović je zajedno sa saradnicima sa Instituta za istraživanje i razvoj farmaceutske kompanije *Zdravlje*, razradio tehnološke postupke za sintezu *atenolola*, *nifedipina*, *nitrendipina*, *nisoldipina* i *medigoksina*, po kojima su ona proizvođena u industrijskim uslovima i količinama za potrebe

Zdravlja – Leskovac, a kasnije i *Actavisa*. Predloženi pronalasci su iz oblasti organske hemijske tehnologije. Razvijeni su jednostavni, efikasni, jeftini i za industrijsku primenu pogodni postupci za dobivanje aktivnih supstanci visokog stepena čistoće i u visokim prinosima, za gore pomenute lekove. Ovaj projekat je bio finansiran od strane Ministarstva za nauku i tehnologiju Republike Srbije (projekt 02M34PT3) u periodu 1994.-1998. godine. *Važnost ovih patenata i na osnovu njih razrađenih tehnoloških postupaka ogleda se u njihovoj direktnoj primeni u praksi, tj. proizvodnji ovih lekova u domaćoj farmaceutskoj industriji*.

Atenolol (patent M92- 9.2.1. sa B lista) se primenjuje kao kardioselektivni beta-blokator, odnosno kao kardioselektivni antagonist beta 1-receptora. Pogodan je za lečenje arterijske hipertenztije, angine pektoris, predkomorske tahiaritmije i tahikardije ili ventrikularne aritmije praćene povišenim nivoom adrenalina.

Dihidropiridinski derivati (patent M92- 9.2.2. sa B liste) se primenjuju za kontrolu visokog krvnog pritiska, sprečavaju ulazak jona kalcijuma u određene ćelije organizma, pre svega u sistemske i koronarno-vaskularne glatke mišiće i miokard, čime usporavaju električnu stimulaciju srca, šire arterije i usporavaju kontrakcije srca i sužavanje arterija. Koriste se za lečenje blago do umereno povišenog krvnog pritiska i za sprečavanje angine pektoris. Ponekad se primenjuje i za lečenje Rejnoovog sindroma.

2.2 Mentorstvo pri izradi master, magistarskih i doktorskih radova

Dr Popović je aktivno učestvovao u ko-mentorstvu sa prof. Stuchebrukhovim pri izradi jedne doktorske i jedne magistarske disertacije dva kandidata na Univerzitetu Kalifornija (UC Davis), SAD:

1. David Beech, "*Is the respiratory proton pumping mechanism in cytochrome c oxidase conserved across multiple life forms*?" (magistarska disertacija), University of California, Davis, SAD, 2009. Zajednički rad: M21- 2.2.10. sa B liste.

2. Ryogo Sugitani, "*Computational studies of proton pumping mechanism and water transport in cytochrome c oxidase*" (doktorska disertacija), University of California, Davis, SAD, 2009. Zajednički rad: 3.4.20. sa B liste.

Takodje, je pružao pomoć pri izradi delova jedne doktorske disertacije na FU Berlin i bio je član komisije za odbranu jedne masters teze na Hemijskom fakultetu Univerziteta u Beogradu:

1. Giulia Morra, "*Role of electrostatics explored with molecular dynamics simulations for protein stability and folding*" (doktorska disertacija), Freie Universität, Berlin, Nemačka, 2005.

2. Član komisije za odbranu master teze: Neda Đorđević, "Simulacija molekulske dinamike ovalbumina. Ispitivanje dostupnosti rastvaraču pozitivno naelektrisanih aminokiselinskih ostataka", Hemijski fakultet, Katedra za biohemiju, Univerzitet u Beogradu, 14. avgust 2015.

Prilog 7: Potvrda prof. Stuchebrukhova/supervisor-a o mentorstvu i pomoći pri izradi delova disertacija gore navedenih kandidata; kopije zahvalnica sa naslovnom stranom odbranjenih doktorskih disertacija; zajednički radovi- 2.2.10. i 3.4.20. sa B liste; Član komisije za odbranu masters teze Nede Đorđević.

2.3 Pedagoški rad

1. Angažovanje u nastavi na Odseku za hemiju, na Slobodnom univerzitetu u Berlinu. U periodu od 22.10.1999.–30.6.2002. godine. Kandidat je obavljao poslove asistenta na predmetu Teorijska biohemija/Kompjuterske simulacije bioloških makromolekula i vodio laboratorijski kurs obuke studenata u korišćenju CHARMM programa.

Prilog 4: Lista aktivnosti Kandidata za vreme doktorskih studija na FU Berlin, u okviru Graduirtenkolleg-a GRK 268.

2. U toku 2017. god. kao gostujući profesor je uspešno držao nastavu studentima magistrantima i doktorantima na predmetu "Računarske metode u biohemiji" na Institutu za hemiju, Univerziteta Filipini Diliman – Quezon City, Manila.

Prilog 6. Pozivno pismo sa univerziteta UP Diliman i druga dokumenta.

2.4 Saradnja sa univerzitetima u inostranstvu

Zajednički radovi su proistekli iz međunarodne saradnje kandidata sa svakim od navedenih profesora i doktora nauka sa liste.

1. University of California, Davis, SAD (prof. Alexei A. Stuchebrukhov), jedan M21a rad, dvanaest M21 radova i dva poglavlja u knjigama 1.1.1. i 1.1.2. sa B liste. Planirana je tekuća saradnja i otvoren je UC Davis Temporary Affiliate account na računarskom klasteru. **Prilog 9**. Saradnja sa univerzitetima u inostranstvu.

2. Institut za probleme fizičke hemije, Ruske akademije nauka, Černogolovka/ Moskva, Ruska Federacija (prof. Emile S. Medvedev), radovi M21- 2.2.9. i M34- 3.4.27. sa B liste.

3. Los Alamos National Laboratory, New Mexico, SAD (Dr. Jason Quenneville), radovi M21- 2.2.8. i M13- 1.1.2. sa B liste, nakon odlaska u Los Alamos.
4. University of Leeds, Velika Britanija (Dr. Dmitry Makhov), radovi M21- 2.2.6. i M34- 3.4.22. sa B liste.

5. Freie Universität Berlin, Nemačka (prof. Ernst-Walter Knapp), radovi M21a- 2.1.1., 2.1.2., 2.1.3., kao i rad M21- 2.2.1. sa B liste.

6. UP Diliman, Quezon City/Manila, Filipini (prof. Ricky Nellas), saradnja u toku.

2.5 Domaća saradnja

Ostvarena saradnja se ogleda u publikovanim radovima iz kategorije M20 i realizovanim patentima.

1. IHTM, Centar za hemiju, Univerzitet u Beogradu (dr Ivana Đorđević, dr Goran Janjić, dr Sonja Grubišić) radovi M13- 1.1.1., M14- 1.2.1., M21- 2.2.2., M22- 2.3.1., M23- 2.4.1. i više saopštenja sa različitih konferencija, svi sa **A liste**.

2. Hemijski fakultet, Katedra za biohemiju, Univerzitet u Beogradu (prof. dr Marija Gavrović-Jankulović) radovi M21- 2.2.1., 2.2.3., 2.2.4., kao i M22- 2.3.2. svi sa **A liste**.

3. TMF, Katedra za organsku hemiju, Univerzitet u Beogradu (dr Nemanja Trišović) radovi M21- 2.2.2. i M22- 2.3.1. sa **A liste**.

4. Zdravlje-Actavis, Leskovac, registrovani patenti na nacionalnom nivou M92- 9.2.1. i 9.2.2. sa B liste.

3. *Organizacija naučnog rada:*

(Rukovođenje projektima, potprojektima i zadacima; tehnološki projekti, patenti, inovacije i rezultati primenjeni u praksi; rukovođenje naučnim i stručnim društvima; značajne aktivnosti u komisijama i telima Ministarstva za nauku i tehnološki razvoj i telima drugih ministarstava vezanih za naučnu delatnost; rukovođenje naučnim institutcijama)

3.1 Rukovođenje naučnim projektima, potprojektima i zadacima

Učešće na projektima, rukovođenje projektnim zadacima:

1. Razvoj nove DFT/elektrostatičke metode (QM/MM), koja sa povećanom tačnošću računa promene slobodne energije pri reakcijama transfera protona ili elektrona u aktivnom mestu u enzimima (2002–2012.), u okviru projekta National Institute of Health (NIH grant project, No. GM 054052) "*Theoretical and computational studies of biological electron transfer*". Rukovodilac projekta: prof. Alexei Stuchebrukhov, University of California Davis.

2. Dizajniranje proračuna i analiza membranskih proteinskih kompleksa, sprezanje elektron- i proton-transfer procesa i pumpanje protona kroz mitohondrijsku mem-branu uz formiranje elektrohemijskog gradienta protona (2002–2012.), u okviru projekta National Science Foundation (NSF grant project, No. PHY 0646273) "*Electron tunneling in proteins*". Rukovodilac projekta: prof. Alexei Stuchebrukhov, University of California Davis.

3. Razvoj softvera za laboratorijske svrhe i analiza mitohondrijskih proteina (2009–2010.), u okviru projekta National Science Foundation (NSF grant project, No. MCB 1022208) "*Importance of the buried charges in proteins*". Rukovodilac projekta: prof. Marilyn Gunner (City University of New York).

4. Razvoj novih postupka za sintezu nifedipina, nitrendipina, nisoldipina, atenolola i medigoksina i transfer tehnologije sa laboratorijskih na industrijske uslove (1994-1998.), u

okviru projekta "*Istraživanje novih metoda za dobijanje bioaktivnih molekula i novih formulacija farmaceutskih i kozmetičkih preparata*" i potprojekta Pp1- "*Istraživanje novih postupaka sinteze i polusinteze i karakterizacija bioaktivnih molekula*", projekat br. 02M34PT3. Rukovodilac projekta: dr Vlastimir Stamenković (Institut za istraživanje i razvoj, farmaceutske industrije *Zdravlje* – Leskovac), finansiran od Ministarstva za nauku i tehnologiju Republike Srbije.

5. Kvanto-mehaničke i elektrostatičke interakcije i njihova važnost za reakcioni mehanizam rada enzima (2013-2019.), u okviru projekta "*Racionalni dizajn i sinteza biološki aktivnih i koordinacionih jedinjenja i funkcionalnih materijala, relevantnih u (bio)nanotehnologiji*", projekat broj 172035, finansiran od Ministarstva za prosvetu, nauku i tehnološki razvoj Republike Srbije. Rukovodilac projekta dr Aleksandar Nikolić, naučni savetnik, NU IHTM, Univerziteta u Beogradu.

6. Takođe u prethodnom periodu, kandidat je bio angažovan na osnovnim naučno-istraživačkim projektima koje je finansiralo Ministarstvo nauke, tehnološkog razvoja i inovacija Republike Srbije, broj projekta od 451-03-68/2020-14/200026 do 451-03-66/2024-03/200026. Tekući br. projekta: 451-03-136/2025-03/200026.

7. Učešće na tekućim projektima COST akcije finansiranim od strane Evropske Unije:

2018–2022, COST akcija CA17120: "Chemobrionics," Brisel – Evropska Unija, rukovodilac akcije: prof. Julyan Cartwright (Španija).

2022–2026, COST akcija CA21101: "Confined Molecular Systems: from a new generation of materials to the stars" (COSY), Brisel – Evropska Unija, rukovodilac akcije: prof. María Pilar de Lara-Castells (Španija).

2023–2027, COST akcija CA22143: "European Materials Informatics Network" (EuMINe), Brisel – Evropska Unija, rukovodilac akcije: prof. Francesco Mercuri (Italija). **Član Upravnog odbora – predstavnik za Srbiju**.

Prilog 8: Potvrde rukovodilaca projekata sa University of California Davis, Research Foundation of the City University of New York, IHTM-a Centar za hemiju, *Zdravlja* – Leskovac. **Prilog 10:** Dokazi o učešću u projekatima COST akcije.

3.2 Tehnološki projekti, patenti, inovacije i rezultati primenjeni u praksi

1. Kandidat je koautor dva YU/RS patenta iz oblasti organske hemijske tehnologije: RS 49569 i RS 49947 (M92- 9.2.1. i 9.2.2. sa B liste), koji opisuju postupke za sintezu aktivnih supstanci za snižavanje visokog krvnog pritiska i insuficijenciju srca. Reč je o beta-blokatorima i blokatorima kalcijumskih kanala, tj. o atenololu, odnosno 1,4-dihidropiridinskim derivatima (nifelatu, nitrendipinu i nisoldipinu). Razvijeni su novi, jednostavni, efikasni, ekonomični i za industrijsku primenu tehnološki pogodni postupci za dobivanje aktivnih supstanci visokog stepena čistoće i u visokim prinosima, za gore pomenute lekove. Ovaj projekat je bio finansiran od strane Ministarstva za nauku i tehnologiju Republike Srbije (projekt 02M34PT3) u periodu 1994.-1998. godine.

Na osnovu ovih patenata, kandidat je zajedno sa saradnicima sa Instituta za istraživanje i razvoj farmaceutske kompanije *Zdravlje*, razvio nove tehnološke postupke za sintezu ovih jedinjenja, po kojima su ona proizvođena u industrijskim uslovima i količinama za potrebe *Zdravlja*, a kasnije i *Actavisa* – Leskovac. *Važnost ovih patenata i na osnovu njih razrađenih tehnoloških postupaka ogleda se u njihovoj direktnoj primeni u praksi, tj. proizvodnji ovih lekova u domaćoj farmaceutskoj industriji*.

Prilog 8: Potvrda rukovodioca projekata dr Vlastimira Stamenkovića, *Zdravlje* – Leskovac; Patenti M92- 9.2.1. i 9.2.2. sa B liste.

2. Postojala je potreba da se razvije metoda, kojom će se sa povećanom tačnošću izračunavati razlika u slobodnoj energiji (ΔG) za reakcije transporta protona između dve *protonabilne* grupe (ΔG_{PT}) ili reakcije transfera elektrona između dva redoks-aktivna metalna centra unutar aktivnog mesta u enzimima (ΔG_{ET}). Radeći kao naučni saradnik u grupi prof. Stuchebrukhova na University of California Davis, dr Popović je razvio novu metodu kombinovanih DFT/elektrostatičkih proračuna (nova verzija QM/MM metode) da bi se sa povećanom tačnosću tretirali kompleksni aktivni centri u proteinima, kao sto je na primer binuklearni centar citohrom c oksidaze.

Detaljan opis metode je dat u originalnim radovima M21- 2.2.5., 2.2.6., 2.2.8., 2.2.12., M22- 2.3.1. kao i monografskim studijama M13- 1.1.1., 1.1.1. sve sa liste B. Novi detalji u vezi uticaja solvatacije na DFT proračune elektronske structure kombinovanjem sa solvatacionim kontinuum elektrostatičkim proračunima su dati u publikaciji **M14- 1.2.5. sa A liste**. Vidi takođe i mišljenje eksperata iz SAD i Evrope u Prilogu 3, prilikom izbora u zvanje Research Assistant Specialist (step 3)/Naučni saradnik na UC Davis-u, SAD.

4. ***Kvalitet naučnih rezultata:***

(Uticajnost; parametri kvaliteta časopisa i pozitivna citiranost kandidatovih radova; efektivni broj radova i broj radova normiran na osnovu broja koautora; stepen samostalnosti i stepen učešća u realizaciji radova u naučnim centrima u zemlji i inostranstvu; doprinos kandidata realizaciji koautorskih radova; značaj radova)

4.1 Uticajnost kandidatovih naučnih radova

Iz analize radova priloženih u bibliografiji, može se videti da je u radovima opisana nova metoda kombinovanih DFT/elektrostatičkih proračuna. Metodom je ispitivana energetika hemijskih reakcija u enzimima, koja je kao takva važna u oblasti biohemije i bioenergetike procesa u proteinima. Na osnovu rezultata ovih proračuna je predložen novi teorijski model za mehanizam rada citohrom c oksidaze, citohrom bc1 kompleksa, fotoliaze i drugih proučavanih enzima. Ovi radovi (M21a- 2.1.2., 2.1.3., 2.1.4., M21- 2.2.2., 2.2.4., 2.2.5., 2.2.12., M22- 2.3.1. sa B liste, kao i novi radovi M14- 1.2.5., 1.2.2., 1.2.4. 1.2.6. i sa A liste) su bili od velike vaznosti za eksperimentaliste u planiranju i dizajniranju novih eksperimenata, što se može videti iz velikog broja njihovih citata u vrhunskim međunarodnim časopisima. Po prirodi stvari, predloženi mehanizmi rada ovih enzima su predmet interesovanja i mnogih teoretičara. Doprinos kandidata ovim radovima je veliki. Tokom realizacije publikovanih radova kandidat je pokazao visok stepen samostalnosti u radu, organizovanju istraživanja i proračuna, prikupljanju i obradi naučnih rezultata i aktivno je učestvovao u diskusiji rezultata i pripremi radova za publikovanje.

Kvalitet publikovanih radova može se sagledati na osnovu toga što je od svih 25 publikovanih radova (kategorije M20), u vrhunskim međunarodnim časopisima kategorija M21a + M21 publikovano čak 21 radova (4 + 17) tj. 84%. Od vrhunskih međunarodnih časopisa u kojima je kandidat publikovao radove treba posebno istaći časopise: *Journal of the American Chemical Society*, sa IF_{2004} 6.903 (3 rada), *Chemistry - A European Journal*, sa IF_{1998} 5.153 (1 rad) i *Biochim. Biophys. Acta-Bioenergetics*, sa IF_{2010} 5.132 (2 rada), koji su među vodećim časopisima u svojoj kategoriji. Od radova sa A liste ističu se vrhunski međunarodni časopisi – *Biomolecules* sa IF_{2021} 6.064, *International Immunopharmacology* sa IF_{2022} 5.6, *Molecular Immunology* sa IF_{2020} 4.407, *Crystal Growth & Design* sa IF_{2018} 4.153 i *Life Sciences* sa IF_{2018} 3.448 (po jedan rad u svakom od njih).

Najveću citiranost prema Scopusu (bez autocitata) imaju sledeći radovi:

1. Zarić, S.D., Popović, D.M., Knapp, E.W. Metal ligand aromatic cation-π interactions in metalloproteins: Ligands coordinated to metal interact with aromatic residues. *Chemistry - A European Journal* 6 (2000) 3935-3942, M21a.
IF: 5.153 (1998); Chemistry, Multidisciplinary 7/126
Citiran: **134**

2. Popović, D.M., Stuchebrukhov, A.A. Proton pumping mechanism and catalytic cycle of cytochrome *c* oxidase: Coulomb pump model with kinetic gating. *FEBS Letters* 566 (2004) 126-130, M21.
IF: 3.912 (2002); Biophysics 12/65
Citiran: **102**

3. Popović, D.M., Stuchebrukhov, A.A. Electrostatic study of the proton pumping mechanism in bovine heart cytochrome *c* oxidase. *Journal of the American Chemical Society* 126 (2004) 1858-1871, M21a.
IF: 6.903 (2004); Chemistry, Multidisciplinary 6/124
Citiran: **101**

4. Zarić, S.D., Popović, D.M., Knapp, E.W. Factors determining the orientation of axially coordinated imidazoles in heme proteins. *Biochemistry* 40 (2001) 7914-7928, M21.
IF: 4.493 (1999); Biochemistry & Molecular Biology 48/295
Citiran: **59**

5. Quenneville, J., Popović, D.M., Stuchebrukhov, A.A. Combined DFT and electrostatics study of the proton pumping mechanism in cytochrome *c* oxidase. *Biochim. Biophys. Acta-Bioenergetics* 1757 (2006) 1035-1046, M21.
IF: 4.237 (2006); Biophysics 9/66
Citiran: **54**

Od radova sa A liste, nakon izbora u zvanje viši naučni saradnik (2015. god.), najcitiraniji je rad:

2.2.2. Janjić G.V., Jelić S.T., Trisović N.P., Popović D.M., Djordjević I.S., Milčić M. K. New Theoretical Insight into Fluorination and Fluorine-Fluorine Interactions as a Driving Force in Crystal Structures. *Crystal Growth & Design* 20 (2020) 2943-2951, M21.

IF: 4.153 (2018); Chemistry, Multidisciplinary, 48/172
Citiran: **41** (bez autocitata)

4.2. Pozitivna citiranost kandidatovih radova

Prema Bibliografiji citata a na osnovu Scopus-a, kandidat ima ukupno 1027 citata, odnosno 847 citata (bez autocitata) u 645 naučnih publikacija, sa ostvarenim h-indeksom = 16. Broj i spisak citata dati su u Prilogu. Rad 2.1.1.(B) u kome je opisan i okarakterisan novi tip katjon-π interakcija, važan za stabilnost aktivnog centra i reakcioni mehanizam u metalo-proteinima, obljavljen u časopisu *Chemistry Eur. J.* citiran je 134 puta. Pored toga, dve teorijsko-računarske studije autora Popovića i Stuchebrukhova, kojima su ispravno predvideli kinetički *gating* mehanizam i redosled koraka u mehanizmu pumpanja protona kroz mitohondrijsku membranu od strane citohrom c oksidaze: rad 2.1.4.(B) "Electrostatic study of the proton pumping mechanism in bovine heart cytochrome *c* oxidase" objavljen u *JACS* citiran je 101 puta; a rad 2.2.2.(B) "Proton pumping mechanism and catalytic cycle of cytochrome *c* oxidase: Coulomb pump model with kinetic gating" objavljen u *FEBS Letters* je citiran 102 puta (od kojih je većina citata u vrhunskim međunarodnim časopisima). Rad 2.2.1.(B) citiran je 59 puta, rad 2.2.8.(B) 54 puta, a još 5 radova [2.2.4.(B), 2.2.5.(B), 2.2.10.(B), 2.1.3.(B) i 2.2.2.(A)] su citirana svaki po više od 40 puta. Hirsch-ov indeks je 16 od 25 publikovanih radova u vodećim međunarodnim časopisima M20 kategorije.

Ako se analizira ko je citirao radove dr Popovića, može se zaključiti da su među njima i najeminentniji naučnici iz oblasti enzimologije, kompjuterske biohemije, katjon-π interakcija, membranskih proteina, protonskih pumpi, reakcija elektron-proton transfera i DNA-fotoliaze, kao što su eksperimentalisti – P. Brzezinski (u 32 rada citira Popovićeve radove), R. Gennis (citati u 26 radova), M. Wikström (citati u 18 radova), M. Verkhovsky (citati u 14 radova), P. Ädelroth (citati u 12 radova), S. Fergusson-Miller (citati u 8 radova), K. Brettel (citati u 9 radova); ili teoretičari – P. Siegbahn (citati u 12 radova), M. Blomberg (citati u 20 radova), M. Gunner (citati u 15 radova), Q. Cui (citati u 13 radova), V.R.I. Kaila (citati u 8 radova). Citiran je i od strane dvojice Nobelovaca – Hartmut Michel-a (11 citata u 6 radova) i Arieh Warshel-a (12 citata u 6 radova).

4.3 Ugled i uticajnost publikacija u kojima su kandidatovi radovi objavljeni

Uticajnost i kvalitet časopisa u kojima su publikovani radovi prikazani su u spisku radova kroz kategoriju časopisa, impakt factor i poziciju časopisa u određenoj oblasti. Iz Bibliografije radova kandidata posebno treba izdvojiti radove u časopisima iz kategorija M21a i M21. Ovo su vrhunski časopisi iz oblasti hemije, biofizike, fizičke hemije, farmacije, biohemije i molekularne biologije, koji su među vodećim časopisima u svojoj kategoriji:

- *Journal of the American Chemical Society* (M21a, 3 rada)
  IF(2004) 6.903, Hemija, multidisciplinarna 6/124;

- *Chemistry: A European Journal* (M21a, 1 rad)
  IF(1998) 5.153, Hemija, multidisciplinarna 7/126;

- *Biochimica et Biophysica Acta: Bioenergetics* (M21, 2 rada)
  IF(2010) 5.132, Biofizika 10/73;

- *Biophysical Journal* (M21, 1 rad)
  IF(2009) 4.390, Biofizika 10/74;

- *International Immunopharmacology* (M21, 1 rad*[A])
  IF(2022) 5.6, Farmakologija & Farmacija 44/278;

- *Biochemistry* (M21, 1 rad)
  IF(1999) 4.493, Biohemija i Molekularna biologija 48/295;

- *Journal of Physical Chemistry B* (M21, 6 radova)
  IF(2008) 4.189, Fizička hemija 22/113;

- *Biomolecules* (M21, 1 rad*[A])
  IF(2021) 6.064, Biohemija i Molekularna biologija 75/297;

- *Crystal Growth & Design* (M21, 1 rad*[A])
  IF(2018) 4.153, Hemija, multidisciplinarna 48/172;

- *FEBS Letters* (M21, 1 rad)
  IF(2002) 3.912, Biofizika 12/65;

- *Life Sciences* (M21, 1 rad*[A])
  IF(2018) 3.448, Farmakologija & Farmacija 76/267;

- *Amino Acids* (M21, 1 rad)
  IF(2012) 3.914, Biohemija i Molekularna biologija 86/290;

- *Proteins: Structure Function & Bioinformatics* (M21, 1 rad)
  IF(2008) 3.419, Biofizika 17/70;

- *ChemPlusChem* (M22, 1 rad*[A])
  IF(2018) 3.441, Hemija, multidisciplinarna 57/172;

- *Molecular Immunology (M22*, 1 rad*[A]*)*
  IF(2020) 4.407, Biohemija i Molekularna biologija 117/296;

- *Photochemical & Photobiological Sciences* (M22, 1 rad),
  IF(2006) 2.416; Fizička hemija 36/108.

4.4. Efektivni broj radova i broj radova normiran na osnovu broja koautora

Na osnovu kriterijuma koji su dati u Pravilniku o postupku i načinu vrednovanja i kvantitativnom iskazivanju naučno-istraživačkih rezultata, i uvidom u broj koautora zaključuje se da ***dva rada*** iz oblasti numeričkih simulacija i molekulskog modelovanja (2.2.2.A i 3.4.1.A) i ***jedan rad*** koji je eksperimentalno-teorijska studija (2.3.2.A) ***podležu normiranju***, dok ***ostali radovi ne podležu normiranju***, kao eksperimentalno-teorijski radovi do 7 koautora, ili kao teorijski radovi sa numeričkim simulacijama do 5 koautora. Tokom realizacije publikovanih radova kandidat je pokazao visok stepen samostalnosti u radu, obradi rezultata i aktivno je učestvovao u diskusiji rezultata i pisanju i pripremi radova za publikovanje.

4.5 Stepen samostalnosti u naučnoistraživačkom radu i uloga u realizaciji radova u naučnim centrima u zemlji i inostranstvu

Dr Dragan Popović pokazuje visok stepen samostalnosti u naučnoistraživačkom radu. Aktivno je učestvovao u svim fazama realizacije objavljenih radova – u planiranju istraživanja i realizaciji eksperimentalnog/teorijskog rada, analizi i interpretaciji dobijenih rezultata, kao i pisanju i pripremi za objavljivanje i prezentaciju svih naučnih publikacija i saopštenja. Za neke od radova je jedini autor, za neke radove je prvi ili corresponding autor, dok je kao ko-autor u drugim radovima dao izuzetno značajan doprinos u izvođenju simulacija/proračuna, u prikupljanju i obradi podataka visoko-naučnog kvaliteta, kao i u analizi i diskusiji dobijenih rezultata.

Stepen samostalnosti izražen sa potvrdama o vođenju projektnih zadataka u domaćim i inostranim naučnim centrima, kao i radovima [sa **A liste:** M14/1.2.1., 1.2.2., 1.2.3., 1.2.4., 1.2.5., 1.2.6., M23- 2.4.1., M53- 5.3.1., 5.3.2.; i sa **liste B:** M13- 1.1.1., M21a- 2.1.2., 2.1.3., 2.1.4., M21- 2.2.2., 2.2.4., 2.2.5., 2.2.10., 2.2.12., 2.2.13., M22- 2.3.1, M53- 5.3.1.] u kojim je dr Popović prvi autor i/ili *corresponding* autor.

Dr Popović je u kategoriji M10 u 7 od ukupno 9 monografskih publikacija jedini, prvi ili corresponding autor (78%). Kandidat je prvi autor u 9 radova u vrhunskim međunarodnim časopisima iz kategorija M21a + M21 (3 + 6) odnosno u 43% od ukupnog broja objavljenih radova u kategorijama M21a + M21 (4 + 17), kao i u jednom radu iz M22 kategorije (33%) i u jedinom radu iz M23 kategorije. U kategorijama M10+M20+M50, prvi je autor u 21 od 37 rada (57%). Rad po pozivu iz kategorije M21- 2.2.13.B je samostalni rad dr Popovića, 7 od 25 radova iz M20 kategorije imaju dva autora, 8 radova imaju tri autora, 2 rada imaju četri autora, dok prestalih 7 radova ima 5 i više autora. Kandidat je jedini autor u sva 3 rada iz kategorije M50. Rezultati koji su publikovani u navedenim radovima, a koji su dobijeni korišćenjem pometnutih računarskih metoda su u velikoj meri realizovani od strane dr Popovića, a njegov doprinos se ogleda i u pisanju celih ili većih delova radova.

4.6. Doprinos kandidata realizaciji koautorskih radova

I u radovima u kojima nije prvi autor, dr Dragan Popović je dao pun doprinos u formiranju celovitih naučnih saznanja i razjašnjenju aktuelnih ispitivanja. Stepen samostalnosti i doprinos kandidata u realizaciji koautorskih radova evidentan je u svim objavljenim radovima, jer je u njihovom stvaranju učestvovao kroz teorijske proračune, analizu i diskusiju dobijenih rezultata, te u pisanju i editovanju delova radova.

VI ISPUNJENOST USLOVA ZA STICANJE PREDLOŽENOG NAUČNOG ZVANJA NA OSNOVU KOEFICIJENTA M

Za prirodno-matematičke i medicinske nauke

Diferencijalni uslov – od prvog izbora u prethodno zvanje do izbora u zvanje	Potrebno je da kandidat ima najmanje XX poena, koji treba da pripadaju sledećim kategorijama:		
		Neophodno-za reizbor XX =	Ostvareno M =
Naučni savetnik	Ukupno	**70**	**81.46**
Obavezni (1)	M10+M20+M31+M32+M33+M41+M42 +M90	50	**71.84**
Obavezni (2)	M11+M12+M21+M22+M23	35	**42.84**

ZAKLJUČAK I PREDLOG KOMISIJE

Na osnovu uvida u priloženu dokumentaciju i razmatranja postignutih i objavljenih rezultata u naučno-istraživačkom radu kandidata, Komisija je došla do zaključka da dosadašnja naučna aktivnost dr Dragana M. Popovića predstavlja značajan doprinos u oblasti teorijsko-računarske hemije, biohemije i molekularne biologije, biofizike, biotehnologije, farmacije, organskih sinteza i u teorijskoj obradi i interpretaciji rezultata, kao i u razvoju i implementaciji nove računarske metode koja kombinuje DFT proračune sa solvatacionim kontinuum elektrostatičkim proračunima i njenoj primeni na biohemijske sisteme. Kandidat je objavio 37 naučnih publikacija u međunarodnim časopisima i monografijama: 3 poglavlja u vodećim naučnim monografijama kategorije M13 (Elsevier i Wiley), 6 poglavlja u istaknutim monografijama kategorije M14, 4 rada objavljena u međunarodnim časopisima izuzetnih vrednosti M21a, 17 radova objavljenih u vrhunskim međunarodnim časopisima M21, 3 rada objavljena u istaknutim međunarodnim časopisima M22, dok je 1 rad u međunarodnom časopisu kategorije M23 i 3 rada u časopisu nacionalnog značaja M53. Kandidat je takođe koautor dva patenta na nacionalnom nivou M92. Rezultate svojih istraživanja izložio je na velikom broju međunarodnih i domaćih naučnih skupova, održao je veliki broj predavanja po pozivu na univerzitetima u inostranstvu i na međunarodnim konferencijama.

Kvalitet publikovanih radova može se sagledati na osnovu činjenice da je od svih 25 objavljenih radova kategorije M20, čak 21 rad objavljen u vrhunskim međunarodnim časopisima kategorija M21a i M21, odnosno 84%. Od 25 objavljena rada 4 su u časopisu sa impakt faktorom (IF) većim od 6, tri rada su sa IF većim od 5, 10 radova sa IF većim od 4, a 6 rada sa IF vecim od 3, samo 2 rada imaju IF manji od 2,5. Ukupan broj svih normiranih M bodova ostvarenih tokom naučno-istraživačkog rada kandidata iznosi **299,36**, dok je ukupan impakt faktor svih M20 objavljenih radova **108,921**, što daje respektabilni prosečan IF od 4,357 po objavljenom radu.

Nakon izbora u zvanje višeg naučnog saradnika, dr Dragan Popović je kao koautor objavio 16 naučnih publikacija, od kojih je jedno poglavlje u vodećoj naučnoj monografiji kategorije M13 (Elsevier), šest poglavlja u istaknutim monografijama kategorije M14, 4 rada objavljena u vrhunskim međunarodnim časopisima kategorije M21, 2 rada u istaknutim međunarodnim časopisima M22, dok je 1 rad u međunarodnom časopisu kategorije M23 i dva u časopisu nacionalnog značaja M53. Održao je predavanje po pozivu na međunarodom skupu štampano u izvodu (M32) i prezentovao je 7 saopštenja štampana u izvodu (M34), kao i jedno saopštenje stampano u celosti (M63) i jedno u izvodu (M64) sa nacionalnog skupa. Svi M20 radovi su objavljeni u časopisima sa visokim impakt faktorom. Od ovih radova, dva rada su objavljena u časopisima sa impakt faktorom (IF) 6,064 i 5,6, dva rada su objavljena u časopisima sa IF većim od 4, a ostali radovi u časopisima sa IF od 3,448 do 1,240. Ukupan IF svih objavljenih radova u kojima je kandidat koautor je **28,353**, dok je ukupno ostvareno M = **81,46** bodova.

Prema Bibliografiji citata a na osnovu Scopus baze podataka na dan 27.05.2025. god., dr Dragan Popović ima ukupno 1027 citata, odnosno 847 citata (bez autocitata) u 645 naučnih publikacija, sa ostvarenim Hirsch-ovim indeksom = 16.

Dr Popović je gost urednik (Guest Editor) u istaknutom međunarodnom naučnom časopisu *Frontiers in Chemistry* (IF_{2022} 5.5) gde je u toku 2024./25. god. uređivao istraživačku temu: "Exploration of the role of heme proteins in biology with experimental and computational methods" (M28b). Pored toga je učestvovao u recenziji velikog broja naučnih radova u časopisima M21/M22 kategorije sa ISI SCI liste. Bio je član lokalnog organizacionog komiteta

dva međunarodna naučna skupa održana 2023. i 2024. god. u Beogradu u okviru COST akcije CA21101 (COSY) i ko-uređivao je zbornike saopštenja sa ova dva naučna skupa (M36).

Pored naučno-istraživačkog rada, kandidat je bio aktivan i u obrazovanju i formiranju naučnih kadrova. Aktivno je učestvovao u izradi i mentorstvu jedne doktorske i jedne magistarske disertacija dva kandidata na UC Davis, SAD. Takodje, je bio član komisije prilikom odbrane master teze jednog kandidata na Hemijskom fakultetu u Beogradu. U toku svoje bogate naučne karijere doktorirao je na Slobodnom Univerzitetu u Berlinu i zatim radio kao gostujući istraživač, gde je obavljao poslove asistenta na predmetu Teorijska biohemija/Kompjuterske simulacije bioloških makromolekula i vodio laboratorijski kurs obuke studenata u korišćenju CHARMM programa. Nakon toga, proveo je desetak godina na renomiranim američkim univerzitetima (University of California i City University of New York) radeći na post-doktorskom usavršavanju, gde je 2007. god. biran u zvanje naučnog saradnika. Kasnije, tokom 2017. god. kao gostujući profesor uspešno je držao nastavu studentima magistarskih i doktorskih studija na predmetu "Računarske metode u biohemiji" na Institutu za hemiju, University of the Philippines Diliman, Metro Manila.

Pored doprinosa u oblasti osnovnih nauka, kandidat je i koautor dva registrovana nacionalna patenta iz oblasti organske hemijske tehnologije koji opisuju postupke za sintezu aktivnih supstanci za snižavanje visokog krvnog pritiska i insuficijenciju srca. Značaj ovih patenata i na osnovu njih izrađenih tehnoloških postupaka ogleda se u njihovoj direktnoj primeni u praksi, tj. proizvodnji ovih lekova u domaćoj farmaceutskoj industriji. Ovi rezultati njegovog naučnog rada, imaju jasnu praktičnu primenljivost.

Dr Dragan Popović je učestvovao u realizaciji više međunarodnih i dva nacionalna naučno-istraživačka projekta, u okviru kojih je uspešno rukovodio realizacijom sedam projektnih zadataka, čija je realizacija rezultirala objavljivanjem radova u međunarodnim časopisima M20 kategorije. On je rukovodio projektnim zadacima u okviru međunarodnih naučno-istraživačkih projekata finansiranih od strane National Institute of Health - NIH (GM 054052), National Science Fondation - NSF (PHY 0646273), NSF (MCB 1022208), kao i Projekata GRK 268 i SFB 498 finansiranih od strane Deutsche Forschungsgemeimschaft-a (DFG). Rukovodio je projektnim zadacima koji se odnose na istraživanje novih metoda za dobijanje i karakterizaciju bioaktivnih molekula u okviru Projekta 02M34PT3 Ministarstva za nauku i tehnologiju, a bio je i rukovodilac projektnih zadataka na Projektu osnovnih istraživanja 172035 kod Ministarstva za nauku Republike Srbije. Trenutno je učesnik dve COST akcije finansirane od Evropske Unije, CA21101 (COSY) i CA22143 (EuMINe, gde je kao član Upravnog odbora – predstavnik za Srbiju).

Izloženo nedvosmisleno ukazuje da je dr Dragan Popović ostvario visok nivo kvaliteta u naučnim istraživanjima u oblasti hemije, biohemije, molekularne biologije, biofizike, imunologije, organske sinteze i u teorijskoj obradi i tumačenju rezultata, čime je ostvario značajan uticaj na razvoj hemije, a takođe, i formalno stekao pravo na izbor u zvanje naučni savetnik.

Na osnovu pregledanog materijala, prikazane analize i ocene postignutih i objavljenih rezultata, Komisija konstatuje da su rezultati naučno-istraživačkog i stručnog rada dr Dragana M. Popovića, višeg naučnog saradnika, Instituta za hemiju, tehnologiju i metalurgiju, Univerziteta u Beogradu, značajni i da kandidat ispunjava sve formalne i suštinske uslove za izbor u zvanje naučni savetnik u skladu sa Zakonom o nauci i istraživanjima ("Službeni glasnik RS", br. 49/19),

Pravilnika o sticanju istraživačkih i naučnih zvanja ("Službeni glasnik RS", br. 159/2020 i 14/2023). Stoga, Komisija, sa zadovoljstvom, predlaže Naučnom veću Univerziteta u Beogradu, Instituta za hemiju, tehnologiju i metalurgiju, Instituta od nacionalnog značaja za Republiku Srbiju da prihvati ovaj izveštaj i predlaže izbor **dr Dragana M. Popovića** u zvanje **naučni savetnik**.

U Beogradu, 05.06.2025. god.

KOMISIJA:

Dr Sonja Grubišić, naučni savetnik, IHTM,
Univerzitet u Beogradu – predsednik komisije

Dr Snežana Spasić, naučni savetnik, IHTM,
Univerzitet u Beogradu – član komisije

Dr Dušanka Radanović, naučni savetnik, IHTM,
Univerzitet u Beogradu – član komisije

Dr Sanja Grgurić-Šipka, redovni professor, Hemijski fakultet
Univerzitet u Beogradu – član komisije