

Чистијашући сајасан  
Јелена Тошовић

УНИВЕРЗИТЕТ У КРАГУЈЕВЦУ  
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ

БИОМЕДИЦИНСКИ ФАКУЛТЕТ  
17.04.2019  
ОС 220/9 - -

## НАСТАВНО-НАУЧНОМ ВЕЋУ ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКОГ ФАКУЛТЕТА У КРАГУЈЕВЦУ

На седници Наставно-научног већа Природно-математичког факултета у Крагујевцу одржаној **27. марта 2019.** године (одлука број: 170/XIV-2) одређени смо у Комисију за писање извештаја о испуњености услова др Јелене Тошовић за стицање звања *научни сарадник*, за научну област Хемија. На основу приложене документације о научно-истраживачком раду кандидата, сагласно критеријумима за стицање научних звања, утврђеним *Правилником о поступку и начину вредновања и квантитативном исказивању научно-истраживачких резултата истраживача* надлежног Министарства, а у складу са *Законом о научноистраживачкој делатности*, подносимо Наставно-научном већу следећи

### И З В Е Ш Т А Ј

#### А. Биографски подаци

Јелена Тошовић је рођена 27.03.1990. године у Крагујевцу. Основну школу „Милутин и Драгиња Тодоровић”, као и средњу, Прву крагујевачку гимназију, завршила је у Крагујевцу као носилац дипломе Вук Каракић. На Природно-математички факултет, студијски програм Хемија, модул Хемичар за истраживање и развој, уписала се школске 2009/2010. године. Основне академске студије завршила је 09.10.2013. године са просечном оценом **9,89**, а дипломске академске студије – мастер, завршила је 6.10.2014. године са просечном оценом **10,00**. У октобру 2014. године, уписала је докторске академске студије, студијски програм Хемија, модул Органска хемија, на Природно-математичком факултету у Крагујевцу. Докторску дисертацију под насловом „**Структурне и антиоксидативне особине хлорогенске киселине**” одбранила је 01.03.2019. године на Природно-математичком факултету у Крагујевцу.

Одлуком Наставно-научног већа од 08.04.2015. године изабрана је у звање асистент за ужу научну област Физичка хемија на Природно-математичком факултету у Крагујевцу, на коме ради и данас. Предмети на којима је ангажована су Физичка хемија 1, Физичка хемија 2, Молекулско моделирање 1, Молекулско моделирање 2 и Рачунари у хемији 1.

За време основних академских студија ишла је месец дана на усавршавање у Велику Британију на Универзитет у Гриничу као учесник ТЕМПУС пројекта. Више пута је награђивана као најбољи студент на години (у школској 2009/10., 2010/11. и 2011/12.). Добитница је стипендије Фонда за младе таленте Републике Србије за 1000 најбољих студената завршних година основних академских студија за школску 2012/2103. годину, као и за 400 најбољих студената завршних година мастер академских студија за школску 2013/2014. годину. Исто тако, добитница је стипендије за најбоље студенте у 2013. години коју додељује Универзитет у Крагујевцу. Добитница је и Специјалног признања за изузетан успех у току студија за 2014. годину коју додељује Српско хемијско друштво. Добитница је и награде Фонда Костић за 2015. годину. Такође, награда за најбољи рад на конференцији **15<sup>th</sup> International Conference on BioInformatics and BioEngineering (BIBE)** у Београду додељена јој је 2015. године.

Тренутно се бави научно-истраживачким радом у области Физичке органске хемије, и то теоријским и експерименталним испитивањем различитих физичко-хемијских особина и реакција неких природних полифенола, првенствено фенолних киселина. До сада је објавила двадесет и три рада у научним часописима, од којих је шеснаест са SCI листе, и десет радова саопштених на конференцијама.

Учесник је пројекта „Синтеза, моделовање, физичко-хемијске и биолошке особине органских једињења и одговарајућих комплекса метала“ (евиденциони број ОИ172016) Министарства науке, просвете и технолошког развоја Републике Србије (2015– ), као и пројекта “Exclusion of antibiotics from the food chain–ABFREE“, Министарства за образовање, науку и спорт Републике Словеније (2019). Такође, била је и учесник билатералног пројекта Србија-Хрватска „Испитивање хемизма и антиоксидативне активности комплекса полифенолних једињења са ёсенцијалним металима“ (2016–2017).

За време студија је два пута била на истраживачким боравцима у иностранству. У склопу билатералног пројекта Србија-Хрватска боравила је две недеље на Универзитету у Загребу у групи професора Владислава Томишића, док је у Великој Британији на Универзитету у Гриничу у групи др Милана Антонијевића провела пет недеља. Тренутно се налази на постдокторском усавршавању на Универзитету у Марибору у групи професора Урбана Брена.

## Б. Библиографија

Др Јелена Тошовић се активно бави научно-истраживачким радом у области Физичке органске хемије. Предмет њеног истраживања су теоријско и експериментално испитивање различитих физичко-хемијских особина и реакција неких природних полифенола, првенствено депсида. Посебна пажња је усмерена на термодинамичко и кинетичко испитивање механизама антиоксидативног дејства различитих полифенолних једињења.

### 1. Докторска дисертација (M71)

Јелена Тошовић „Структурне и антиоксидативне особине хлорогенске киселине“, Природно-математички факултет, Универзитет у Крагујевцу, Крагујевац, 2019.  
6 бодова

### 2. Научни радови публиковани у међународним часописима (M20)

Научни радови публиковани у међународним часописима изузетних вредности (M21a)

#### 2.1. J. Tošović, S. Marković

Antioxidative activity of chlorogenic acid relative to trolox in aqueous solution – DFT study; *Food Chemistry*, 278 (2019) 469–475.

DOI: 10.1016/j.foodchem.2018.11.070; ISSN: 0308-8146; IF = 4.946 за 2017. годину; 5/71; област: Chemistry, Applied; Категорија: M21a; Број цитата (без самоцитата): /; 10 бодова

#### 2.2. J. Tošović, S. Marković, J. M. Dimitrić Marković, M. Mojović, D. Milenković

Antioxidative mechanisms in chlorogenic acid; *Food Chemistry*, **237** (2017) 390–398. DOI:10.1016/j.foodchem.2017.05.080; ISSN: 0308-8146; IF = 4.946 за 2017. годину; 5/71; област: Chemistry, Applied; Категорија: **M21a**; Број цитата (без самоцитата): 6; **10 бодова**

**2.3. S. Marković, J. Tošović**

Comparative study of the antioxidative activities of caffeoylquinic and caffeic acids; *Food Chemistry*, **210** (2016) 585–592. DOI: 10.1016/j.foodchem.2016.05.019; ISSN: 0308-8146; IF = 4.946 за 2017. годину; 5/71; област: Chemistry, Applied; Категорија: **M21a**; Број цитата (без самоцитата): 12; **10 бодова**

**Научни радови публиковани у врхунским часописима међународног значаја (M21)**

**2.4. S. Marković, J. Tošović, J. M. Dimitrić Marković**

Synergic application of spectroscopic and theoretical methods to the chlorogenic acid structure elucidation; *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, **164** (2016) 67–75. DOI: 10.1016/j.saa.2016.03.044; ISSN: 1386-1425; IF = 2.536 за 2016. годину; 12/42; област: Spectroscopy; Категорија: **M21**; Број цитата (без самоцитата): 2; **8 бодова**

**2.5. S. Radenković, J. Tošović, R. W. A. Haverinck, P. Bultinck**

Ring currents in benzo- and benzocyclobutadieno-annelated biphenylene derivatives; *ChemPhysChem*, **16** (2015) 216–222. DOI: 10.1002/cphc.201402468; ISSN: 1439-4235; IF = 3.419 за 2014. годину; 41/139; област: Chemistry, Physical; Категорија: **M21**; Број цитата (без самоцитата): 8; **8 бодова**; Нормирано на 4 аутора – **6,67 бодова**

**Научни радови публиковани у истакнутим часописима међународног значаја (M22)**

**2.6. J. Tošović, S. Marković**

Reactivity of chlorogenic acid towards hydroxyl and methyl peroxy radicals relative to trolox in nonpolar media; *Theoretical Chemistry Accounts*, **137** (2018) 76. DOI: 10.1007/s00214-018-2251-y; ISSN: 1432-881X; IF = 1.890 за 2016. годину; 86/146; област: Chemistry, Physical; Категорија: **M22**; Број цитата (без самоцитата): 8; **5 бодова**

**2.7. J. Tošović, S. Marković**

Reproduction and interpretation of the UV-vis spectra of some flavonoids; *Chemical Papers*, **71** (2017) 543–552. DOI: 10.1007/s11696-016-0002-x; ISSN: 0366-6352; IF = 1.326 за 2015. годину; 97/163; област: Chemistry, Multidisciplinary; Категорија: **M22**; Број цитата (без самоцитата): 1; **5 бодова**

**2.8. S. Marković, J. Tošović**

Application of Time-Dependent Density Functional and Natural Bond Orbital Theories to the UV-vis Absorption Spectra of Some Phenolic Compounds; *Journal of Physical Chemistry A*, **119** (2015) 9352–9362. DOI: 10.1021/acs.jpca.5b05129; ISSN: 1089-5639; IF = 2.883 за

2015. годину; 55/144; област: Chemistry, Physical; Категорија: **M22**; Број цитата (без самоцитата): 9; **5 бодова**

**2.9. S. Radenković, J. Tošović, J. Đurđević Nikolić**

Local aromaticity in naphtho-annelated fluoranthenes: Can the five-membered rings be more aromatic than the six-membered rings?; *Journal of Physical Chemistry A*, **19** (2015) 4972–4982. DOI: 10.1021/acs.jpca.5b01817; ISSN: 1089-5639; IF = 2.883 за 2015. годину; 55/144; област: Chemistry, Physical; Категорија: **M22**; Број цитата (без самоцитата): 6; **5 бодова**

**2.10. I. Gutman, J. Tošović, S. Radenković, S. Marković**

On atom-bond connectivity index and its chemical applicability; *Indian Journal of Chemistry. Section A: Inorganic, Physical, Theoretical and Analytical Chemistry*, **51A** (2012) 690–694. DOI: нема; ISSN: 0376-4710; IF = 0.920 за 2010. годину; 83/147; област: Chemistry, Multidisciplinary; Категорија: **M22**; Број цитата (без самоцитата): /; **5 бодова**; Нормирано на 4 аутора – **4,17 бодова**

**Научни радови публиковани у часописима међународног значаја (M23)**

**2.11. A. Burmudžija, S. Marković, J. Muškinja, A. Pejović, J. Tošović**

Influence of counterion on methylation of some ambident nucleophiles. DFT study; *Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis*, **123(1)** (2018) 201-214. DOI :10.1007/s11144-017-1263-2; ISSN: 1878-5190; IF = 1.515 за 2017. годину; 107/146; област: Chemistry, Physical; Категорија: **M23**; Број цитата (без самоцитата): /; **3 бода**; Нормирано на 5 аутора – **1,67 бодова**

**2.12. J. Tošović, S. Marković**

Structural and antioxidative features of chlorogenic acid; *Croatica Chemica Acta*, **89** (2016) 535-541. DOI: 10.5562/cca3026; ISSN: 0011–1643; IF = 0.586 за 2016. годину; 144/166; област: Chemistry, Multidisciplinary; Категорија: **M23**; Број цитата (без самоцитата): /; **3 бода**

**2.13. Z. Marković, J. Tošović, D. Milenković, S. Marković**

Revisiting the solvation enthalpies and free energies of the proton and electron in various solvents, *Computational and Theoretical Chemistry*, **1077** (2016) 11–17. DOI: 10.1016/j.comptc.2015.09.007; ISSN: 2210-271X; IF = 1.549 за 2016. годину; 101/146; област: Chemistry, Physical; Категорија: **M23**; Број цитата (без самоцитата): 18; **3 бода**; Нормирано на 4 аутора – **2,5 бода**

**2.14. S. Marković, Lj. Mitrović, J. Đurđević, J. Tošović, Z. Petrović**

Alkylation of potassium ethyl acetoacetate: HSAB versus Marcus theory; *Computational and Theoretical Chemistry*, **1066** (2015) 14–19. DOI: 10.1016/j.comptc.2015.05.005; ISSN: 2210-271X; IF = 1.403 за 2015. годину; 104/144; област: Chemistry, Physical; Категорија: **M23**; Број цитата (без самоцитата): 1; **3 бода**; Нормирано на 5 аутора – **1,67 бодова**

- 2.15. M. D. Antonijević, M. Arsović, J. Čáslavský, V. Cvetković, P. Dabić, M. Franko, G. Ilić, M. Ivanović, N. Ivanović, M. Kosovac, D. Medić, S. Najdanović, M. Nikolić, J. Novaković, T. Radovanović, Đ. Ranić, B. Šajatović, G. Špajunović, I. Stankov, J. Tošović, P. Trebše, O. Vasiljević, J. Schwarzbauer**

Actual contamination of the Danube and Sava Rivers at Belgrade (2013); *Journal of the Serbian Chemical Society*, **79** (2014) 1169–1184. DOI: 10.2298/JSC131105014A; ISSN: 0352-5139; IF = 0.871 за 2014. годину; 114/157; област: Chemistry, Multidisciplinary; Категорија: M23; Број цитата (без самоцитата): 8; 3 бода; Нормирано на 23 аутора – 0,83 бода

- 2.16. I. Gutman, J. Tošović**

Testing the quality of molecular structure descriptors. Vertex-degree-based topological indices; *Journal of the Serbian Chemical Society*, **78** (2013) 805–810. DOI: 10.2298/JSC121002134G; ISSN: 0352-5139; IF = 0.889 за 2013. годину; 105/148; област: Chemistry, Multidisciplinary; Категорија: M23; Број цитата (без самоцитата): 53; 3 бода

### **3. Стручни радови објављени у националним научним часописима (M50)**

#### **Научни радови публиковани у врхунским часописима националног значаја (M51)**

- 3.1. I. Redžepović, S. Marković, J. Tošović**

Antioxidative activity of caffeic acid – mechanistic DFT study; *Kragujevac Journal of Science*, **39** (2017) 109–122. DOI: 10.5937/KgJSci1739109R; ISSN: 1450 – 9636; UDC: 541.127:547.587.52; Категорија: M51; 2 бода

- 3.2. J. Tošović**

Spectroscopic features of caffeic acid: Theoretical study; *Kragujevac Journal of Science*, **39** (2017) 99–108. DOI: 10.5937/KgJSci1739099T; ISSN: 1450 – 9636; UDC: 541.18.02:543.5:547.587.52; Категорија: M51; 2 бода

#### **Научни радови публиковани у часописима националног значаја (M53)**

- 3.3. И. Гутман, J. Тошовић**

Други закон термодинамике и покушаји да се он изврда; *Хемијски преглед*, **57** (2016) 155–159. ISSN: 04406826; UDC: 54.011.93; Категорија: M53; 1 бод

- 3.4. J. Тошовић, И. Гутман**

Вештачке молекулске машине; *Хемијски преглед*, **57** (2016) 142–148. ISSN: 04406826; UDC: 54.011.93; Категорија: M53; 1 бод

- 3.5. J. Tošović, S. Marković, D. Milenković, Z. Marković**

Solvation enthalpies and Gibbs energies of the proton and electron – influence of solvation models; *Journal of the Serbian Society for Computational Mechanics*, **2** (2016) 66–76. ISSN: 1820-6530; UDC: 539.125.4:66.093.1, 539.124:66.093.1; Категорија: M53; 1 бод

- 3.6. Д. Миленковић, J. Тошовић, С. Марковић, З. Марковић**

Реакције прелаза електрона: Маркусова теорија; *Хемијски преглед*, 57 (2016) 92–97.  
ISSN: 04406826; Категорија: M53; 1 бод

4. Предавања по позиву на међународним научним конференцијама штампано у изводу (M32) – 1,5 бодова

4.1. **J. Tošović, S. Marković**

Determination of chlorogenic acid structure using combined experimental and theoretical NMR study, *AdriaticNMR*, Croatia (2018) p. 38. ISBN: 978-953-6076-42-0

5. Саопштења са међународних скупова штампана у целини (M33) – 1 бод

5.1. **J. Tošović, S. Marković**

Reactivity of chlorogenic acid toward hydroxyl radical relative to Trolox in benzene, *14th International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry*, Beograd, Srbija (2018) p. 125-128. ISBN: 978-86-82475-36-1

5.2. **S. Marković, J. Tošović**

Hydrogen atom transfer mechanism in chlorogenic acid, *13th International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry*, Beograd, Srbija (2016) p. 67-70. ISBN: 978-86-82475-34-7

5.3. **J. Tošović, Ž. Milošević, S. Marković**

Simulation of the UV-Vis Spectra of Flavonoids, *15<sup>th</sup> International Conference on BioInformatics and BioEngineering (BIBE)*, Beograd, Srbija (2015) p. 1-6. DOI: 10.1109/BIBE.2015.7367646; ISBN: 978-1-4673-7982-3

6. Саопштења са међународних скупова штампана у изводу (M34) – 0,5 бодова

6.1. **J. Tošović, S. Marković**

Behavior of chlorogenic acid dianion towards free radicals in water solution, *The 30th International Course and Conference on the Interfaces among Mathematics, Chemistry and Computer Sciences (Math/Chem/Comp, MC<sup>2</sup>-30)*, Dubrovnik, Croatia (2018) p. 18. Нема ISBN број

6.2. **J. Tošović, S. Marković, D. Milenković**

Antioxidative activity of chlorogenic acid: DFT study, *The 29th International Course and Conference on the Interfaces among Mathematics, Chemistry and Computer Sciences (Math/Chem/Comp, MC<sup>2</sup>-29)*, Dubrovnik, Croatia (2017) p. 8. Нема ISBN број

6.3. **I. Redžepović, S. Marković, J. Tošović**

Theoretical investigation of antioxidative activity of caffeic acid, *4th South-East European Conference on Computational Mechanics (SEECCM)*, Kragujevac, Srbija (2017) p. 24. ISBN: 978-86-921243-0-3

- 6.4. **J. Tošović, S. Marković, J.M. Dimitrić Marković**  
Structural and antioxidative features of chlorogenic acid, *The 28th International Course and Conference on the Interfaces among Mathematics, Chemistry and Computer Sciences (Math/Chem/Comp, MC2-28)*, Dubrovnik, Croatia (2016) p. 28. Нема ISBN број
7. Саопштење са националног скупа штампано у целини (M63) – 1 бод
- 7.1. **J. Tošović, S. Marković, J. M. Dimitrić Marković**  
Struktura hlorogenske kiseline: spektroskopski i kvantno-mehanički pristup/ The structure of chlorogenic acid: spectroscopic and quantum mechanical approach, *XXI Symposium on biotechnology with international participation*, Čačak, Srbija (2016) p. 809- 814. ISBN: 978-86-87611-41-2; ISBN: 978-86-87611-42-9 (niz)
8. Саопштење са националног скупа штампано у изводу (M64) – 0,2 бода
- 8.1. **J. Tošović, S. Marković**  
Mehanizmi antioksidativne aktivnosti hlorogenske kiseline: termodinamički pristup/Antioxidative mechanisms of chlorogenic acid: a thermodynamic approach, *Treća konferencija mladih hemičara Srbije*, Beograd, Srbija (2015) p. 94.  
ISBN: 978-86-7132-059-7

## B. Приказ радова

### 1. Приказ докторске дисертације

Предмет докторске дисертације је испитивање структурних особина, қао и испитивање антиоксидативног потенцијала хлорогенске киселине. Посебна пажња је усмерена ка термодинамичком и кинетичком испитивању механизма антиоксидативног деловања овог једињења. На основу добијених резултата, могу се извести следећи закључци:

Детаљна конформациона анализа је показала да хлорогенска киселина (**5CQA**) постоји као комплексна смеша различитих конформера. Заједничка особина свих ових конформера је да карбоксилни водоник није окренут ка карбоксилном кисеонику, већ ка кисеонику суседне хидроксилне групе. Предложени најстабилнији конформер **5CQA** у раствору је у савршеној сагласности са структуром добијеном помоћу софистицираних NMR експеримената које су извели Форино и његови сарадници.

Експериментално добијени Raman-ски и NMR спектри **5CQA** су у сагласности са постојећим резултатима из литературе. Веома добро слагање између симулираних и експерименталних спектара је такође доказ да су атоми у молекулу **5CQA** правилно распоређени. NLMO кластери су омогућили информативан опис UV спектра молекула **5CQA**. Као што је и очекивано, UV траке потичу од  $\pi \rightarrow \pi^*$  и  $n \rightarrow \pi^*$  прелаза.

Најстабилније конформације структурних изомера молекула **5CQA**, неохлорогенска (**3CQA**) и криптохлорогенска киселина (**4CQA**), су такође утврђене детаљном конформационом анализом.

Показано је да особине хидроксициметног дела у одговарајућим радикалима, анјонима и радикал катјонима добијеним из кафеоилхинских и кафеинске (**CA**) киселине су веома

личне и практично не зависе од положаја естерификације. Хински део остаје непромењен у свим новонасталим реактивним врстама. Последица тога је да све четири фенолне киселине имају сличне вредности термодинамичких параметара: BDE (*Bond Dissociation Enthalpy*), PA (*Proton Affinity*), ETE (*Electron Transfer Enthalpy*), IP (*Ionisation Potential*) и PDE (*Proton Dissociation Enthalpy*). Из свега наведеног се може закључити да **СА** и кафеолхинске киселине испољавају веома сличну антиоксидативну активност, што је у сагласности са резултатима добијеним помоћу различитих експерименталних тестова.

За потребе одређивања термодинамичких параметара систематично је испитана и енталпија солватисаног протона и електрона у двадесет најчешће коришћених растварача различите поларности помоћу једанаест теоријских модела. На основу добијених вредности термодинамичких параметара откријено је да ни једна од испитиваних фенолних киселина не подлеже SET-PT (*Single Electron Transfer – Proton Transfer*) механизму. Може се претпоставити да је у неполарним растварачима HAT (*Hydrogen Atom Transfer*) главни реакциони пут, док су у поларним растварачима HAT и SPLET (*Sequential Proton Loss Electron Transfer*) компетитивни механизми.

ESR (*Electron Spin Resonance*) експерименти су показали да је **5CQA** селективна према DPPH<sup>•</sup>, HO<sup>•</sup> и HOO<sup>•</sup>/O<sub>2</sub><sup>–</sup> радикалима. Узимајући у обзир да су ESR експерименти извођени у киселој средини, термодинамичка испитивања искључују могућност да било који од испитиваних радикала подлеже SPLET и SET-PT механизмима. Откријено је да у воденом раствору ниједан механизам није погодан за реакцију између **5CQA** и O<sub>2</sub><sup>–</sup>, што води ка закључку да је у киселој средини HOO<sup>•</sup> одговоран за понашање HOO<sup>•</sup>/O<sub>2</sub><sup>–</sup> смеше. HAT и RAF (*Radical Adduct Formation*) су повољни реакциони механизми у случају реакција **5CQA** са HO<sup>•</sup> и HO<sup>•</sup>, док је у случају DPPH<sup>•</sup> радикала једини очекивани механизам HAT.

Применом QM-ORSA (*Quantum Mechanics-based test for Overall free Radical Scavenging Activity*) рачунарске методологије добијено је да **5CQA** и тролокс (Tx) са HO<sup>•</sup> радикалом реагују преко HAT и RAF механизама, док је у случају CH<sub>3</sub>OO<sup>•</sup> радикала HAT једини могући реакциони пут у неполарним растварачима. **5CQA** је реактивнија према HO<sup>•</sup>, док је према CH<sub>3</sub>OO<sup>•</sup> мање реактивна од Tx.

Антиоксидативни механизми **5CQA** и Tx у поларној базној средини су знатно комплекснији. На pH = 7.4 **5CQA** постоји у облику моноанјона (87 %) и дианјона (13 %), док се Tx доминантно налази у облику моноанјона (> 99 %). У реакцији са HO<sup>•</sup> радикалом **5CQA**<sup>–</sup> подлеже HAT и RAF механизмима. У базној средини је омогућен губитак протона, што води ка настанку **5CQA**<sup>2–</sup>. У присуству HO<sup>•</sup> радикала **5CQA**<sup>2–</sup> спонтано прелази у **5CQA**<sup>•–</sup>. Даље, у реакцији **5CQA**<sup>•–</sup> са HO<sup>•</sup> добијају се хинон анјон и вода, као и [5CQA-OH]<sup>–</sup>, преко HAT и RAF реакционих путева. У ова два случаја је испитиван феномен □ реактивност у два спинска стања, који имплицира да се трансформација триплетних реактаната у синглетне производе догађа на две површине потенцијалне енергије. Све реакције дианјона су контролисане дифузијом. Из овог разлога је његов допринос у хватању HO<sup>•</sup> подједнако важан као и допринос заступљенијег моноанјона. Израчуната константа брзине износи  $4.83 \times 10^9 \text{ M}^{-1}\text{s}^{-1}$  и у савршеној је сагласности са експерименталном вредношћу од  $3.34 \pm 0.19 \times 10^9 \text{ M}^{-1}\text{s}^{-1}$ .

**5CQA**<sup>–</sup> са CH<sub>3</sub>OO<sup>•</sup> радикалом реагује искључиво преко HAT механизма и реакција је значајно спорија од оне са HO<sup>•</sup>.

Упркос израженим разликама везаним за оперативне реакционе путеве, као и за њихове константе брзина, редослед реактивности **5CQA** према изабраним радикалима је исти у поларној и неполарној средини.

Детаљан приказ резултата докторске дисертације је дат у оквиру радова под редним бројевима 2.1, 2.2, 2.3, 2.4, 2.8, 2.12 и 2.13.

## 2. Приказ научних радова

### 2.1. Приказ радова из категорије M21a

**Рад 2.1.** Хлорогенска киселина је полифеноло једињење које се налази у различитом бођу и поврћу и позната је по високој биолошкој активности. Помоћу теорије функционала густине испитана је антиоксидативна активност овог једињења у односу на тролокс у присуству  $\text{HO}^{\bullet}$  и  $\text{CH}_3\text{OO}^{\bullet}$  у воденом раствору на  $\text{pH}=7.4$ . Ово је прво истраживање у коме је описано понашање моногранјона и дијанјона хлорогенске киселине при физиолошким условима. Оба анјонска облика подлежу искључиво НАТ механизму при реакцији са  $\text{CH}_3\text{OO}^{\bullet}$ . У случају  $\text{HO}^{\bullet}$ , хлорогенска киселина подлеже свим испитиваним механизмима: НАТ, RAF, SPLET и SET-PT механизму. Допринос дијанјона у хватању  $\text{HO}^{\bullet}$  је подједнако значајан као и допринос знатно присутнијег моногранјона. Израчунате константе брзина за укупну реакцију хлорогенске киселине са  $\text{HO}^{\bullet}$  је у савршеној сагласности са експерименталном вредношћу. У поређењу са тролоксом, хлорогенска киселина је реактивнија према  $\text{HO}^{\bullet}$ , а мање реактивна према  $\text{CH}_3\text{OO}^{\bullet}$ .

**Рад 2.2.** Поред ESR експеримента, ово истраживање обухвата термодинамичко и механистичко испитивање: НАТ, RAF, SPLET и SET-PT механизма хлорогенске киселине у бензену, метанолу и води. Добијено је да SET-PT није повољан антиоксидативни механизам. RAF реакцији путеви су бржи, али НАТ дају термодинамички стабилније производе, што указује на то да у киселим и неутралним срединама хлорогенска киселина може да реагује преко оба механизма. У базним срединама (нпр. при физиолошким условима) SPLET је највероватнији антиоксидативни механизам.

**Рад 2.3.** Изведена је детаљна конформациона анализа како би се добили најстабилнији конформери хлорогенске, криптохлорогенске и неохлорогенске киселине. Симулирани и експериментални NMR спектри кафеолхинских киселина су у одличној сагласности. Како би се спровело термодинамичко испитивање главних антиоксидативних механизама: НАТ, SPLET и SET-PT, израчунате су ентальпије дисоцијације везе, афинитети према протону, ентальпије трансфера електрона, јонизациони потенцијали и ентальпије дисоцијације везе ових једињења и кафеинске киселине у бензену, метанолу и води. Сва једињења имају веома сличне вредности свих термодинамичких параметара, што указује на то да показују упоредиве антиоксидативне активности. Ова претпоставка је у савршеној сагласности са експерименталним истраживањима. НАТ је највероватнији механизам у неполарним срединама, док су НАТ и SPLET компетитивни реакцији путеви у поларним срединама.

### 2.2. Приказ радова из категорије M21

**Рад 2.4.** Иако је хлорогенска киселина позната по својим бенефитима по људско здравље, њена структура још увек није у потпуности разјашњена. Ово је прво истраживање коме је циљ да додринесе разјашњењу структуре овог једињења упоређивањем експерименталних и симулираних вибрационих, NMR и UV спектара. Детаљном информационом анализом су добијени настабилнији конформери у гасовитој фази и у раствору (DMSO и метанол). Постигнута је одлична сагласност између свих израчунатих и експерименталних спектара, што указује на исправан распоред атома у молекулу. На хинском делу молекула се налазе усмерене

водоничне везе, које условљавају да да карбоксилни водоник није окренут ка карбоксилном кисеонику, већ ка кисеонику суседне хидроксилне групе. Познавање финих структурних детаља, тј. конформације хлорогенске киселине, представља чврсту основу за сва остала испитивања која се односе на ово једињење.

**Рад 2.5.** У серији деривата бифенилена испитани су ефекти бензо и бензоциклобутадиено анелација на густину електронских струја. Ангуларне бензо анелације повећавају, док линеарне умањују интензитет паратропних (антиароматичних) струја у четворочланом прстену бифенилена. Супротан ефекат је пронађен код бензоциклобутадиено анелација. Показано је да локална ароматичност у четворочланом прстену деривата бифенилена може да варира од високо ароматичне до неароматичне у зависности од начина анелације.

### 2.3. Приказ радова из категорије M22

**Рад 2.6.** Примењен је квантно-механички тест за одређивање укупне антиоксидативне активности како би се испитао антиоксидативни капацитет хлорогенске киселине у односу на тролокс (референтно једињење). Испитивани су HAT, RAF, SPLET и SET-PT реакциони путеви за рекације хлорогенске киселине и тролокса са  $\text{HO}^{\bullet}$  и  $\text{CH}_3\text{OO}^{\bullet}$  радикалима у бензену и пентил етаноату. Оба једињења реагују са  $\text{HO}^{\bullet}$  преко HAT и RAF механизма, док је HAT механизам једини вероватан у случају  $\text{CH}_3\text{OO}^{\bullet}$ . Мање реактивни слободни радикали су погоднији за одређивање антиоксидативне активности једињења у односу на тролокс, док је у случају испитивања свих могућих реакционих путева неопходно да се укључе веома реактивни слободни радикали.

**Рад 2.7.** UV-vis спектри 15 флавоноида који се могу наћи у природи су симулирани и упоређени са литературним експерименталним подацима. Слагања између спектара за изабране флавоноиде су задовољавајућа. Комбиновани TDDFT и NLMO резултати су искоришћени за детаљну анализу спектара. Пронађено је да се електронски прелази из везивних NLMO кластера у LUMO кластер догађају на већим таласним дужинама, док се прелази из HOMO и HOMO-1 кластера у невезивне NLMO кластере догађају на мањим таласним дужинама. Код свих флавоноида се на великом таласним дужинама догађају HOMO  $\rightarrow$  LUMO и HOMO-1  $\rightarrow$  LUMO прелази, док су за умерене таласне дужине одговорни HOMO  $\rightarrow$  LUMO+1 прелази.

**Рад 2.8.** Систематично су испитани UV-vis спектри 22 природна фенолна једињења, антрахинона, неофлавоноида и флавоноида. За симулирање спектара коришћена је временски зависна теорија функционала густине (TDDFT) у комбинацији са различитим функционалима. Како би се боље разјаснила прерасподела електронске густине која се догађа приликом ексцитације примењена је NBO анализа. Узимајући у обзир да просторна и енергетска сепарација, као и природа  $\pi$  веза, усамљених електронских парова и  $\pi^*$  антивезивних природних локализованих молекулских орбитала (NLMO), конструисани су "NLMO кластери". NLMO кластер треба разумети као део молекула окарактерисан одговарајућом електронском густином. Показано је да је неопходно да се испитају све апсорpcionе траке, као и сви електронски прелази како би се у потпуности разјаснило UV-vis спектар одређеног једињења. Наше истраживање је показало да су TDDFT и NBO теорије комплементарне, зато што се резултати могу комбиновати како би се интерпретирао UV-vis спектар.

**Рад 2.9.** Све теорије које се базирају на Кекулеовим структурама предвиђају да је централни петочлани прстен у флуорантенима и нафтоанелираним флуорантенима неароматичан. У овом

истраживању спроведено је детаљно испитивање локалне ароматичности у серији нафтоанелираних деривата флуорантена помоћу следећих индекса ароматичности: ef, BRE, MCI, HOMA, NICS и мапе кружних струја. Пронађено је да је према ef, BRE, MCI и HOMA вредностима петочлани прстен у неким нафтоанелираним флуорантенима може бити чак и више ароматичан у односу на неке шесточлане прстенове.

**Рад 2.10.** Критичко преиспитивање потврђује да ABC индекс добро репродукује топлоту образовања алкана. Шта више, проста емпиријска формула  $\Delta H_f^\circ = \square (a + b \times ABC)$ , при чему је  $a = 65,98$ ,  $b = 20,37$ , репродукује топлоте образовања са тачношћу која је упоредива са оном добијеном помоћу *ab initio* метода на високом новоу и DFT (MP2, B3LYP) квантно хемијских прорачуна.

### 2.3. Приказ радова из категорије M23

**Рад 2.11.** Испитивање су реакције амбидентатних анјона YCHX- и нуклеоfila YCHXNa (X, Y = CH<sub>2</sub>, O и S) са CH<sub>3</sub>F у гасовитој фази и у THF-у. Циљ рада је био да се испита утицај контрајона (Na<sup>+</sup> у овом случају) на реакционе системе. Пронађено је да је ред реaktivности неамбидентатних анјона следећи: CH<sub>2</sub>CHCH<sub>2</sub><sup>□</sup> > OCHO<sup>□</sup> > SCHS<sup>□</sup>. Са друге стране, реaktivност неамбидентатних нуклеофиле је другачија: CH<sub>2</sub>CHCH<sub>2</sub>Na > SCHSNa > OCHONa. Други ред реaktivности је у сагласности са хемијском интуицијом, јер је инверзно пропорционалан редоследу тврдоће одређених нуклеофилних атома: C < S < O. Амбидентатни нуклеофили се понашају другачије у две различите средине, што значи да растварачи такође утичу на испитивање реакције. С-метиловање је погодније од S- и O-метиловања, а S-метиловање је мање неповољно од O-метиловања у гасовитој фази. У THF растварачу O- и S-метиловање су кинетички контролисани, а компетитивно C-метиловање је термодинамички контролисано. На овај начин је доказана применљивост тврдо-меке кисело-базне теорије на испитиваним реакцијама. Резултати овог рада такође представљају чврст доказ нашег приступа који укључује утицај контрајона на реакционе системе. Контрајони постоје у реакционим системима и њихов утицај не треба занемаривати.

**Рад 2.12.** Упоређивањем експерименталних и симулираних IR, Raman, <sup>1</sup>H-NMR, <sup>13</sup>C-NMR и UV-vis спектара, овај рад даје допринос разјашњењу структуре хлорогенске киселине. Најстабилнији конформери у гасовитој фази и у раствору су коришћени за све симулације. Постигнуто је одлично слагање између експерименталних и симулираних спектара што указује на исправан распоред атома у молекулу хлорогенске киселине. Додатно је испитана и антиоксидативна активност хлорогенске киселине помоћу приступа који се заснива на рачунању термодинамичких параметара. Пронађено је да је у неполарним растварачима НАТ механизам највероватнији, док су у поларној средини компетитивни НАТ и SPLET антиоксидативни механизми. Сви квантно-хемијски прорачуни су изведени помоћу MN12-SX методе. Ова метода даје сличне резултате као и B3LYPD2, B3LYP-D3 и M06-2X функционали.

**Рад 2.13.** У научној литератури постоји само неколико вредности за ентальпију и слободну енергију солватације протона и електрона из којих се добијају ентальпије и слободне енергије солватисаног протона и електрона. Последње величине су од значаја за термодинамичко моделирање антиоксидативних својстава у срединама у којима се реакције заиста и одвијају. Овај рад попуњава ову празнину у научној литератури. Наиме, спроведено је систематично испитивање солватационе ентальпије и слободне енергије протона и електрона у двадесет најчешће коришћених растварача различите поларности. У те сврхе, коришћено је једанаест *ab initio* и DFT метода. Термодинамичке вредности добијене на B3LYP/Aug-cc-pVTZ нивоу

теорије су у веома доброј сагласности са неколико познатих вредности за енталпију солватације протона и електрона и препоручује се да се ове вредности користе за испитивање антиоксидативне активности у различитим растворачима.

**Рад 2.14.** Спроведено је испитивање реакција између калијум етил ацетоацетата (KEAE) са  $C_2H_5X$  ( $X = Cl, Br$  и  $I$ ) у гасовитој фази, тетрахидрофурану и хексаметилфосфорамиду на B3LYP/6-311+G(d,p) нивоу теорије. C3- и O2-етиловање су испитивани како би се утврдило да ли Маркусова или HSAB теорија могу да објасне амбидентатну реактивност овог нуклеофила. Нађено је да је O2-етиловање KEAE са сва три халогена и кинетички и термодинамички неповољно у свим срединама. Виша енергија активације у положају O2 је последица привлачних сила између кисеоника и калијума, које су често неправедно занемарене. Ово откриће демонстрира да Маркусова теорија није применљива за испитивање реакције. Са друге стране, реакција је умногоме зависна од расподеле наелектрисања и HOMO-LUMO сепарације у реакционим комплексима, што потврђује применивост HSAB теорије. Изведен је следећи закључак: што је мањи атомски број халогена у етил халогениду и што је поларнија средина, повољнија је расподела наелектрисања за O2-етиловање KEAE; што је већи атомски број халогена и мање поларна средина, мања је HOMO-LUMO сепарација и фаворизованије је C3-етиловање.

**Рад 2.15.** Истраживање се базира на детаљном испитивању загађења река Дунава и Саве у реону Београда. Примењиване су различите аналитичке методе које могу да открију како органске загађиваче у води из река, тако и тешке метале у седиментима. Свеукупно загађење воде је на умереном нивоу. Највећи део параметара није указао на необична запажања. Значајнија загађења су регистрована за хром, никал, цинк и делимично бакар у седиментима са вредностима вишим од дозвољених по српским регулативама.

**Рад 2.16.** Корелациона способност 20 тополошких индекса који су присутни у хемијској литератури је тестирана у случају топлоте образовања и нормалне тачке кључања изомера октана. Пronађено је да је корелациона способност највећег броја ових индекса или јако слаба или је нема. Најбоље резултате су показали *augmented* загребачки индекс и ABC индекс.

## Г. Цитираност

Према базама података (*Web of Science* и *Scopus*) укупан број цитата објављених радова др Јелене Тошовић искључујући самоцитате износи 124.

Списак цитата:

- Рад 2.2.** **J. Tošović, S. Marković, J. M. Dimitrić Marković, M. Mojković, D. Milenković**  
Antioxidative mechanisms in chlorogenic acid; *Food Chemistry*, **237** (2017) 390–398. DOI:10.1016/j.foodchem.2017.05.080; ISSN: 0308-8146; IF = 4.946 за 2017. годину; 5/71; област: Chemistry, Applied; Категорија: **M21a**

Цитиран је у:

1. Liao, XX; Greenspan, P; Pegg, RB, *Characterizing the phenolic constituents and antioxidant capacity of Georgia peaches*, *FOOD CHEMISTRY* **271** (2019) 345-353; DOI: 10.1016/j.foodchem.2018.07.163; ISSN: 0308-8146
2. Martelli, G; Giacomini, D, *Antibacterial and antioxidant activities for natural and synthetic dual-active compounds*, *EUROPEAN JOURNAL OF MEDICINAL CHEMISTRY* **158** (2018) 91-105; DOI: 10.1016/j.ejmech.2018.09.009; ISSN: 0223-5234

3. Napoli, E; Siracusa, L; Ruberto, G; Carrubba, A; Lazzara, S; Speciale, A; Cimino, F; Saija, A; Cristani, M, *Phytochemical profiles, phototoxic and antioxidant properties of eleven Hypericum species - A comparative study*, PHYTOCHEMISTRY **152** (2018) 162-173; DOI: 10.1016/j.phytochem.2018.05.003; ISSN: 0031-9422
4. Liu, HW; Zhao, JS; Li, K; Deng, W, *Effects of chlorogenic acids-enriched extract from Eucommia ulmoides leaves on growth performance, stress response, antioxidant status and meat quality of lambs subjected or not to transport stress*, ANIMAL FEED SCIENCE AND TECHNOLOGY **238** (2018) 47-56; DOI: 10.1016/j.anifeedsci.2018.02.003; ISSN: 0377-8401
5. Lemus-Mondaca, R; Vega-Gálvez, A; Rojas, P; Stucken, K; Delporte, C; Valenzuela-Barra, G; Jagus, RJ; Agüero, MV; Pasten, A, *Antioxidant, antimicrobial and anti-inflammatory potential of Stevia rebaudiana leaves: effect of different drying methods*, JOURNAL OF APPLIED RESEARCH ON MEDICINAL AND AROMATIC PLANTS **11** (2018) 37-46; DOI: 10.1016/J.JARMAP.2018.10.003; ISSN: 2214-7861
6. Petrović, ZD; Simijonović, D; Đorović, J; Milovanović, V; Marković, Z; Petrović, VP, *One-Pot Synthesis of Tetrahydropyridine Derivatives: Liquid Salt Catalyst vs Glycolic Acid Promoter. Structure and Antiradical Activity of the New Products*, CHEMISTRYSELECT **2** (2017) 11187-11194; DOI: 10.1002/slct.201701873; ISSN: 2365-6549

**Рад 2.3.**

**S. Marković, J. Tošović**

Comparative study of the antioxidative activities of caffeoylquinic and caffeic acids; *Food Chemistry*, **210** (2016) 585–592. DOI: 10.1016/j.foodchem.2016.05.019; ISSN: 0308-8146; IF = 4.946 за 2017. годину; 5/71; област: Chemistry, Applied; Категорија: M21a

**Цитиран је у:**

1. Wang, AH; Lu, Y; Du, X; Shi, P; Zhang, H, *A theoretical study on the antioxidant activity of Uralenol and Neuralenol scavenging two radicals*, STRUCTURAL CHEMISTRY **29** (2018) 1067-1075; DOI: 10.1007/s11224-018-1090-8; ISSN: 1040-0400
2. Li, XC; Chen, B; Zhao, XJ; Chen, DF, *2-Phenyl-4,4,5,5-tetramethylimidazoline-1-oxyl 3-oxide Radical (PTIO center dot) Trapping Activity and Mechanisms of 18 Phenolic Xanthones* MOLECULES **23** (2018) 1692; DOI: 10.3390/molecules23071692; ISSN: 1420-3049
3. Petrović, ZD; Simijonović, D; Đorović, J; Milovanović, V; Marković, Z; Petrović, VP, *One-Pot Synthesis of Tetrahydropyridine Derivatives: Liquid Salt Catalyst vs Glycolic Acid Promoter. Structure and Antiradical Activity of the New Products*, CHEMISTRYSELECT **2** (2017) 11187-11194; DOI: 10.1002/slct.201701873; ISSN: 2365-6549
4. Tang, N; Skibsted, LH, *Sequential Proton Loss Electron Transfer in Deactivation of Iron(IV) Binding Protein by Tyrosine Based Food Components*, JOURNAL OF AGRICULTURAL AND FOOD CHEMISTRY **65** (2017) 6195-6210; DOI: 10.1021/acs.jafc.7b02420; ISSN: 0021-8561
5. Dechayont, B; Itharat, A; Phuaklee, P; Chunthorng-Orn, J; Juckmeta, T; Prommee, N; Nuengchampong, N; Hansakul, P, *Antioxidant activities and phytochemical constituents of Antidesma thwaitesianum Mull. Arg. leaf extracts*, JOURNAL OF INTEGRATIVE MEDICINE-JIM **15** (2017) 310-319; DOI: 10.1016/S2095-4964(17)60334-0; ISSN: 2095-4964

6. Xie, MH; Chen, GJ; Hu, B; Zhou, L; Ou, SY; Zeng, XX; Sun, Y, *Hydrolysis of Dicaffeoylquinic Acids from Ilex kudingcha Happens in the Colon by Intestinal Microbiota*, JOURNAL OF AGRICULTURAL AND FOOD CHEMISTRY **64** (2016) 9624-9630 DOI: 10.1021/acs.jafc.6b04710; ISSN: 0021-8561
7. Amić, A; Marković, Z; Marković, JMD; Jeremić, S; Lučić, B; Amić, D, *Free radical scavenging and COX-2 inhibition by simple colon metabolites of polyphenols: A theoretical approach*, COMPUTATIONAL BIOLOGY AND CHEMISTRY **65** (2016) 45-53 DOI: 10.1016/j.compbiochem.2016.09.013; ISSN: 1476-9271
8. Moglia, A; Acquadro, A; Eljounaidi, K; Milani, AM; Cagliero, C; Rubiolo, P; Genre, A; Cankar, K; Beekwilder, J; Comino, C, *Genome-Wide Identification of BAHD Acyltransferases and In vivo Characterization of HQTlike Enzymes Involved in Caffeoylquinic Acid Synthesis in Globe Artichoke*, FRONTIERS IN PLANT SCIENCE **7** (2016) 1424; DOI: 10.3389/fpls.2016.01424; ISSN: 1664-462X
9. Rasouli, H; Farzaei, MH; Mansouri, K; Mohammadzadeh, S; Khodarahmi, R, *Plant Cell Cancer: May Natural Phenolic Compounds Prevent Onset and Development of Plant Cell Malignancy? A Literature Review*, MOLECULES **21** (2016) 1104; DOI: 10.3390/molecules21091104; ISSN: 1420-3049
10. Ivanović, N; Jovanović, Lj; Marković, Z; Marković, V; Joksović, MD; Milenković, D; Đurđević, PT; Ćirić, A; Joksović, Lj, *Potent 1,2,4-Triazole-3-thione Radical Scavengers Derived from Phenolic Acids: Synthesis, Electrochemistry, and Theoretical Study*, CHEMISTRYSELECT **1** (2016) 3870-3878; DOI: 10.1002/slct.201600738; ISSN: 2365-6549
11. Xue, Y; Liu, Y; Luo, Q; Wang, H; Chen, R; Liu, Y; Li, Y, *Antiradical Activity and Mechanism of Coumarin-Chalcone Hybrids: Theoretical Insights*, JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A, **122** (2018) 8520-8529; DOI: 10.1021/ACS.JPCA.8B06787; ISSN: 1089-5639
12. Xue, Y; Liu, Y; Zhang, L; Wang, H; Luo, Q; Chen, R; Liu, Y; Li, Y, *Antioxidant and spectral properties of chalcones and analogous aurones: Theoretical insights*, INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY **119** (2018) e25808; DOI: 10.1002/qua.25808; ISSN: 1097-461X

**Рад 2.4.      S. Marković, J. Tošović, J. M. Dimitrić Marković**

Synergic application of spectroscopic and theoretical methods to the chlorogenic acid structure elucidation; *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, **164** (2016) 67–75. DOI: 10.1016/j.saa.2016.03.044; ISSN: 1386-1425; IF = 2.536 за 2016. годину; 12/42; област: Spectroscopy; Категорија: M21

**Цитиран је у:**

1. Dimić, D; Milenković, D; Ilić, J; Šmit, B; Amić, A; Marković, Z; Marković, JD, *Experimental and theoretical elucidation of structural and antioxidant properties of vanillylmandelic acid and its carboxylate anion*, SPECTROCHIMICA ACTA PART A-MOLECULAR AND BIOMOLECULAR SPECTROSCOPY **198** (2018) 61-70 DOI: 10.1016/j.saa.2018.02.063; ISSN: 1386-1425
2. Dimic, D; Milenkovic, D; Markovic, Z; Markovic, JD, *Structural and spectral analysis of 3-methoxytyramine, an important metabolite of dopamine*, JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE **1134** (2017) 226-236; DOI:10.1016/j.molstruc.2016.12.082; ISSN: 0022-2860

**Рад 2.5.      S. Radenković, J. Tošović, R. W. A. Havenith, P. Bultinck**

Ring currents in benzo- and benzocyclobutadieno-annelated biphenylene derivatives; *ChemPhysChem*, **16** (2015) 216–222. DOI: 10.1002/cphc.201402468; ISSN: 1439-4235; IF = 3.419 за 2014. годину; 41/139; област: Chemistry, Physical; Категорија: M21

**Цитиран је у:**

1. Firouzi, R; Shafie, H; Tohidnia, H, *Characterization of Local Aromaticity in Polycyclic Conjugated Hydrocarbons Based on Anisotropy of  $\pi$ -Electron Density*, *CHEMISTRYSELECT* **2** (2017) 11526-11536; DOI: 10.1002/slct.201702407; ISSN: 2365-6549
2. Charistos, ND; Papadopoulos, AG; Nikopoulos, TA; Munoz-Castro, A; Sigalas, MP, *Canonical Orbital Contributions to the Magnetic Fields Induced by Global and Local Diatropic and Paratropic Ring Currents* *JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY* **38** (2017) 2594-2604; DOI: 10.1002/jcc.24917; ISSN: 0192-8651
3. Jin, ZX; Teo, YC; Teat, SJ; Xia, Y, *Regioselective Synthesis of [3]Naphthylenes and Tuning of Their Antiaromaticity*, *CHEMISTRYSELECT* **139** (2017) 15933-15939; DOI: 10.1021/jacs.7b09222; ISSN: 0002-7863
4. Ayub, R; El Bakouri, O; Jorner, K; Sola, M; Ottosson, H, *Can Baird's and Clar's Rules Combined Explain Triplet State Energies of Polycyclic Conjugated Hydrocarbons with Fused 4n  $\pi$ - and (4n+2) $\pi$ -Rings?*, *JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY* **82** (2017) 6327-6340; DOI: 10.1021/acs.joc.7b00906; ISSN: 0022-3263
5. Baryshnikov, GV; Valiev, RR; Minaev, BF; Agren, H, *computational study of aromaticity and photophysical properties of unsymmetrical azatrioxa[8]circulenes*, *NEW JOURNAL OF CHEMISTRY* **41** (2017) 2717-2723; DOI: 10.1039/c6nj03925a; ISSN: 1144-0546
6. Obayes, HR; Azaw, KFA; Khazaal, SH; Alwan, GH; Al-Gebori, AM; Al-Hamadani, AH; Al-Amiry, A, *Theoretical Studies on Electrophilic Aromatic Substitution Reaction for 8-Hydroxyquinoline*, *ORIENTAL JOURNAL OF CHEMISTRY* **32** (2016) 253-260 DOI: 10.13005/ojc/320127; ISSN: 0970-020X
7. Ceulemans, A; Arvanitidis, AG, *Directed Graphs and Induced Magnetic Multipoles in Polycyclic Hydrocarbons*, *BULLETIN OF THE CHEMICAL SOCIETY OF JAPAN* **88** (2015) 1553-1560; DOI: 10.1246/bcsj.20150135; ISSN: 0009-2673
8. Firouzi, R; Shafie, H; Tohidnia, H; *Characterization of Local Aromaticity in Polycyclic Conjugated Hydrocarbons Based on Anisotropy of  $\pi$ -Electron Density*, *CHEMISTRYSELECT* **2** (2017) 11526-11536; DOI: 10.1002/slct.201702407; ISSN: 0002-7863

**Рад 2.7.**

**J. Tošović, S. Marković**

Reproduction and interpretation of the UV-vis spectra of some flavonoids; *Chemical Papers*, **71** (2017) 543–552. DOI: 10.1007/s11696-016-0002-x; ISSN: 0366-6352; IF = 1.326 за 2015. годину; 97/163; област: Chemistry, Multidisciplinary; Категорија: M22

**Цитиран је у:**

1. Ajmala Shireen, P; Abdul Mujeeb, VM; Muraleedharan, K, *Theoretical insights on flavanones as antioxidants and UV filters: A TDDFT and NLMO study*, *JOURNAL OF PHOTOCHEMISTRY AND PHOTOBIOLOGY B: BIOLOGY* **170** (2017) 286-294; DOI: 10.1016/j.jphotobiol.2017.04.021; ISSN: 1011-1344

**Рад 2.8.****S. Marković, J. Tošović**

Application of Time-Dependent Density Functional and Natural Bond Orbital Theories to the UV-vis Absorption Spectra of Some Phenolic Compounds; *Journal of Physical Chemistry A*, **119** (2015) 9352–9362. DOI: 10.1021/acs.jpca.5b05129; ISSN: 1089-5639; IF = 2.883 за 2015. годину; 55/144; област: Chemistry, Physical; Категорија: M22

**Цитиран је у:**

1. Dineshkumar, S; Laskar, IR, *Study of the mechanoluminescence and 'aggregation-induced emission enhancement' properties of a new conjugated oligomer containing tetraphenylethylene in the backbone: application in the selective and sensitive detection of explosive*, POLYMER CHEMISTRY **9** (2018) 5123-5132; DOI: 10.1039/c8py01153b; ISSN: 1759-9954
2. Zhang, J; Hill, N; Lalevee, J; Fouassier, JP; Zhao, JC; Graff, B; Schmidt, TW; Kable, SH; Stenzel, MH; Coote, ML; Xiao, P, *Multihydroxy-Anthraquinone Derivatives as Free Radical and Cationic Photoinitiators of Various Photopolymerizations under Green LED*, MACROMOLECULAR RAPID COMMUNICATIONS **39** (2018) 1800172; DOI: 10.1002/marc.201800172; ISSN: 1022-1336
3. Tikhonov, SA; Svistunova, IV; Samoilov, IS; Osmushko, IS; Borisenko, AV; Vovna, VI, *Electronic structure of binuclear acetylacetones of boron difluoride*, JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE **1160** (2018) 92-100 DOI: 10.1016/j.molstruc.2018.02.005; ISSN: 0022-2860
4. Arczewska, M; Kaminski, DM; Gieroba, B; Gagos, M, *Acid-Base Properties of Xanthohumol: A Computational and Experimental Investigation*, JOURNAL OF NATURAL PRODUCTS **80** (2017) 3195-3203; DOI: 10.1021/acs.jnatprod.7b00530; ISSN: 0163-3864
5. Pasha, SS; Yadav, HR; Choudhury, AR; Laskar, IR, *Synthesis of an aggregation-induced emission (AIE) active salicylaldehyde based Schiff base: study of mechanoluminescence and sensitive Zn(II) sensing*, JOURNAL OF MATERIALS CHEMISTRY C **5** (2017) 9651-9658; DOI: 10.1039/c7tc03046k; ISSN: 2050-7526
6. Shireena, PA; Mujeeb, VMA; Muraleedharan, K, *Theoretical insights on flavanones as antioxidants and UV filters: A TDDFT and NLMO study*, JOURNAL OF PHOTOCHEMISTRY AND PHOTOBIOLOGY B: BIOLOGY **170** (2017) 286-294; DOI: 10.1016/j.jphotobiol.2017.04.021; ISSN: 1011-1344
7. Đorović, J; Marković, Z; Petrović, ZD; Simijonović, D; Petrović, VP, *Theoretical analysis of the experimental UV-Vis absorption spectra of some phenolic Schiff bases*, MOLECULAR PHYSICS **115** (2017) 2460-2468; DOI: 10.1080/00268976.2017.1324183; ISSN: 0026-8976
8. Alam, P; Kachwal, V; Laskar, IR, *A multi-stimuli responsive "AIE" active salicylaldehyde-based Schiff base for sensitive detection of fluoride*, SENSORS AND ACTUATORS B-CHEMICAL **228** (2016) 539-550; DOI: 10.1016/j.snb.2016.01.024; ISSN: 0925-4005
9. Luchian, R; Vinteler, E; Chis, C; Vasilescu, M; Leopold, N; Chis, V, *Molecular Structure of Phenytoin: NMR, UV-Vis and Quantum Chemical Calculations*, CROATICA CHEMICA ACTA **88** (2015) 511-522; DOI: 10.5562/cca2767; ISSN: 0011-1643

**Рад 2.9.****S. Radenković, J. Tošović, J. Đurđević Nikolić**

Local aromaticity in naphtho-annealed fluoranthenes: Can the five-membered rings be more aromatic than the six-membered rings?; *Journal of Physical Chemistry A*, **19**

(2015) 4972–4982. DOI: 10.1021/acs.jpca.5b01817; ISSN: 1089-5639; IF = 2.883 за 2015. годину; 55/144; област: Chemistry, Physical; Категорија: M22

**Цитиран је у:**

1. Ogawa, N; Yamaoka, Y; Yamada, KI; Takasu, K, *Synthesis of pi-Extended Fluoranthenes via a KHMDS-Promoted Anionic-Radical Reaction Cascade*, ORGANIC LETTERS **19** (2017) 3327-3330; DOI: 10.1021/acs.orglett.7b01538; ISSN: 1523-7060
2. Antić, M; Furtula, B; Radenković, S, *Aromaticity of Nonplanar Fully Benzenoid Hydrocarbons* JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A **121** (2017) 3616-3626; DOI: 10.1021/acs.jpca.7b02521; ISSN: 1089-5639
3. Chaolumen; Murata, M; Wakamiya, A; Murata, Y, *Dithieno-Fused Polycyclic Aromatic Hydrocarbon with a Pyracylene Moiety: Strong Antiaromatic Contribution to the Electronic Structure*, ORGANIC LETTERS **19** (2017) 826-829; DOI:10.1021/acs.orglett.6603819; ISSN: 1523-7060
4. Bhattacharya, D; Shil, S; Misra, A; Bytautas, L; Klein, DJ, *Toward Molecular Magnets of Organic Origin via Anion-pi Interaction Involving m-Aminyl Diradical: A Theoretical Study*, JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A **120** (2016) 9117-9130; DOI: 10.1021/acs.jpca.6b09666; ISSN: 1089-5639
5. Wu, JJ; Zhu, J, *The Clar Structure in Inorganic BN Analogues of Polybenzenoid Hydrocarbons: Does it Exist or Not?*, CHEMPHYSCHM **16** (2015) 3806-3813; DOI: 10.1002/cphc.201500811; ISSN: 1439-4235
6. Peck-Schrage, SGH; Bazúa-Rueda, ER, *Peng-Robinson Equation of State Model for Polycyclic Aromatic Hydrocarbons and Long-Chain Hydrocarbons Solubilities in Supercritical Fluids. Correlations Based on Solute Molecular Properties*, JOURNAL OF CHEMICAL AND ENGINEERING DATA **63** (2018) 4061-4075; DOI: 10.1021/acs.jced.8b00447; ISSN: 0021-9568

**2.13. Z. Marković, J. Tošović, D. Milenković, S. Marković**

Revisiting the solvation enthalpies and free energies of the proton and electron in various solvents, *Computational and Theoretical Chemistry*, **1077** (2016) 11–17. DOI: 10.1016/j.comptc.2015.09.007; ISSN: 2210-271X; IF = 1.549 за 2016. годину; 101/146; област: Chemistry, Physical; Категорија: M23

**Цитиран је у:**

1. Marković, Z; Filipović, M; Manojlović, N; Amić, A; Jeremić, S; Milenković, D, *QSAR of the free radical scavenging potency of selected hydroxyanthraquinones*, CHEMICAL PAPERS **72** (2018) 2785-2793; DOI: 10.1007/s11696-018-0534-3; ISSN: 0366-6352
2. Li, YK; Toscano, M; Mazzone, G; Russo, N, *Antioxidant properties and free radical scavenging mechanisms of cyclocurcumin*, NEW JOURNAL OF CHEMISTRY **42** (2018) 12698-12705; DOI: 10.1039/c8nj01819g; ISSN: 1144-0546
3. Daryanavard, M; Hadadzadeh, H; Farrokhpour, H; Weil, M, *Utilization of CO<sub>2</sub> as a carbon source for production of CO and syngas using a ruthenium(II) electrocatalyst*, JOURNAL OF CO<sub>2</sub> UTILIZATION **26** (2018) 612-622; DOI:10.1016/j.jcou.2018.06.018; ISSN: 2212-9820
4. Hofer, TS; Hunenberger, PH, *Absolute proton hydration free energy, surface potential of water, and redox potential of the hydrogen electrode from first principles: QM/MM MD free-energy simulations of sodium and potassium hydration*, JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS **148** (2018) 222814 DOI: 10.1063/1.5000799; ISSN: 0021-9606

5. Dimić, D; Milenković, D; Ilić, J; Šmit, B; Amić, A; Marković, Z; Marković, JD, *Experimental and theoretical elucidation of structural and antioxidant properties of vanillylmandelic acid and its carboxylate anion*, SPECTROCHIMICA ACTA PART A-MOLECULAR AND BIOMOLECULAR SPECTROSCOPY **198** (2018) 61-70; DOI: 10.1016/j.saa.2018.02.063; ISSN: 1386-1425
6. Jeremić, S; Amić, A; Stanojević-Pirkovic, M; Marković, Z, *Selected anthraquinones as potential free radical scavengers and P-glycoprotein inhibitors*, ORGANIC & BIOMOLECULAR CHEMISTRY **16** (2018) 1890-1902 DOI: 10.1039/c8ob00060c; ISSN: 1477-0520
7. Simijonović, D; Petrović, ZD; Milovanović, VM; Petrović, VP; Bogdanović, GA, *A new efficient domino approach for the synthesis of pyrazolyl-phthalazine-diones. Antiradical activity of novel phenolic products*, RSC ADVANCES **8** (2018) 16663-16673; DOI: 10.1039/c8ra02702a; ISSN: 2046-2069
8. Dimić, DS; Milenković, DA; Marković, JMD; Marković, ZS, *Thermodynamic and kinetic analysis of the reaction between biological catecholamines and chlorinated methylperoxy radicals*, MOLECULAR PHYSICS **116** (2018) 1166-1178; DOI: 10.1080/00268976.2017.1414967; ISSN: 0026-8976
9. Yu, SS; Wang, YS; Maa, YJ; Wang, LM; Zhu, J; Liu, SG, *Structure, thermal stability, antioxidant activity and DFT studies of trisphenols and related phenols*, INORGANICA CHIMICA ACTA **468** (2017) 159-170; DOI: 10.1016/j.ica.2017.07.022; ISSN: 0020-1693
10. Dao, DQ; Ngo, TC; Thong, NM; Nam, PC, *Is Vitamin A an Antioxidant or a Pro-oxidant?*, JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B **121** (2017) 9348-9357 DOI: 10.1021/acs.jpcb.7b07065; ISSN: 1520-6106
11. Barzegar, A, *The role of intramolecular H-bonds predominant effects in myricetin higher antioxidant activity*, COMPUTATIONAL AND THEORETICAL CHEMISTRY **1115** (2017) 239-247; DOI: 10.1016/j.comptc.2017.06.020; ISSN: 2210-271X
12. Toscano, M; Ritacca, AG; Mazzone, G; Russo, N, *Theoretical investigation of the action mechanisms of N,N-di-alkylated diarylamine antioxidants*, THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS **136** (2017) 89; DOI: 10.1007/s00214-017-2122-y; ISSN: 1432-881X
13. Dimić, D; Milenković, D; Marković, JD; Marković, Z, *Antiradical activity of catecholamines and metabolites of dopamine: theoretical and experimental study*, PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS **19** (2017) 12970-12980; DOI: 10.1039/c7cp01716b; ISSN: 1463-9076
14. Pang, R; Yu, LJ; Zhang, M; Tian, ZQ; Wu, DY, *DFT Study of Hydrogen-Bonding Interaction, Solvation Effect, and Electric-Field Effect on Raman Spectra of Hydrated Proton*, JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A **120** (2016) 8273-8284 DOI: 10.1021/acs.jpca.6b07064; ISSN: 1089-5639
15. Toscano, M; Russo, N, *Soybean aglycones antioxidant activity. A theoretical investigation*, COMPUTATIONAL AND THEORETICAL CHEMISTRY **1077** (2016) 119-124; DOI: 10.1016/j.comptc.2015.11.008; ISSN: 2210-271X
16. Jiang, S; Zhang, TY; Zhang, X; Zhang, GH; Hai, L; Li, B, *Synthesis, structural characterization, and chemical properties of pentacoordinate model complexes for the active site of [Fe]-hydrogenase*, RSC ADVANCES **87** (2016) 84139-84148; DOI: 10.1039/c6ra18628a; ISSN: 2046-2069

17. Ahmadi, S; Marino, T; Prejanò, M; Russo, N; Toscano, M, *Antioxidant properties of the Vam3 derivative of resveratrol*, MOLECULES **23** (2018) 2446; DOI: 10.3390/molecules23102446; ISSN:1420-3049
18. Malloum, A; Fifen, JJ; Dhaouadi, Z; Engo, SGN; Jaidane N-E, *Solvation energies of the proton in ammonia explicitly versus temperature*, JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS **146** (2016) 134308; DOI: 10.1063/1.4979568; ISSN: 0021-9606

**Рад 2.14.**

**S. Marković, Lj. Mitrović, J. Đurđević, J. Tošović, Z. Petrović**

Alkylation of potassium ethyl acetoacetate: HSAB versus Marcus theory; Computational and Theoretical Chemistry, **1066** (2015) 14–19. DOI: 10.1016/j.comptc.2015.05.005; ISSN: 2210-271X; IF = 1.403 за 2015. годину; 104/144; област: Chemistry, Physical; Категорија: M23

**Цитиран је у:**

1. Malloum, A; Fifen, JJ; Dhaouadi, Z; Engo, SGN; Jaidane, NE, *Solvation energies of the proton in ammonia explicitly versus temperature*, JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS **146** (2017) 134308; DOI: 10.1063/1.4979568; ISSN: 0021-9606

**Рад 2.15.**

**M. D. Antonijević, M. Arsović, J. Časlavský, V. Cvetković, P. Dabić, M. Franko, G. Ilić, M. Ivanović, N. Ivanović, M. Kosovac, D. Medić, S. Najdanović, M. Nikolić, J. Novaković, T. Radovanović, Đ. Ranić, B. Šajatović, G. Špijunović, I. Stankov, J. Tošović, P. Trebše, O. Vasiljević, J. Schwarzbauer**

Actual contamination of the Danube and Sava Rivers at Belgrade (2013); Journal of the Serbian Chemical Society, **79** (2014) 1169–1184. DOI: 10.2298/JSC131105014A; ISSN: 0352-5139; IF = 0.871 за 2014. годину; 114/157; област: Chemistry, Multidisciplinary; Категорија: M23

**Цитиран је у:**

1. Milanov, DR; Krstić, PM; Marković, VR; Jovanović, AD; Baltić, MB; Ivanović, SJ; Jovetić, M; Baltic, ZM, *Analysis of heavy metals concentration in tissues of three different fish species included in human diet from Danube river, in the Belgrade region, Serbia*, ACTA VETERINARIA-BEOGRAD **66** (2016) 89-102; DOI: 10.1515/acve-2016-0007; ISSN: 0567-8315
2. Milanović, M; Suđi, J; Letić, NG; Radonić, J; Sekulić, MT; Miloradov, MV; Milić, N, *Seasonal variations of bisphenol A in the Danube River by the municipality of Novi Sad, Serbia*, JOURNAL OF THE SERBIAN CHEMICAL SOCIETY **81** (2016) 333-345; DOI: 10.2298/JSC150721095M; ISSN: 0352-5139
3. Skrbić, BD; Kadokami, K; Antić, I; Jovanović, G, *Micro-pollutants in sediment samples in the middle Danube region, Serbia: occurrence and risk assessment*, ENVIRONMENTAL SCIENCE AND POLLUTION **25** (2018) 260-273; DOI: 10.1007/s11356-017-0406-3; ISSN: 0944-1344
4. Relić, D; Popović, A; Đorđević, D; Caslavsky, J, *Occurrence of synthetic musk compounds in surface, underground, waste and processed water samples in Belgrade, Serbia*, ENVIRONMENTAL EARTH SCIENCES **76** (2017) 122; DOI: 10.1007/s12665-017-6441-z; ISSN: 1866-6280
5. Pawlowicz, ET, *Organic pollution of water and human health*, HEALTH PROBLEMS OF CIVILIZATION **11** (2017) 32-39; DOI: 10.5114/hpc.2017.65528; ISSN: 2353-6942

6. Crnković, DM; Antanasijević, DZ; Pocajt, VV; Perić-Grujić, AA; Antonović, D; Ristić, MD, *Unsupervised classification and multi-criteria decision analysis as chemometric tools for the assessment of sediment quality: A case study of the Danube and Sava River*, CATENA **144** (2016) 11-22; DOI: 10.1016/j.catena.2016.04.025; ISSN: 0341-8162
7. Ilijević, K; Obradović, M; Jevremović, V; Grzetić, I, *Statistical analysis of the influence of major tributaries to the eco-chemical status of the Danube River*, ENVIRONMENTAL MONITORING AND ASSESSMENT **187** (2015) 553; DOI: 10.1007/s10661-015-4740-y; ISSN: 0167-6369
8. Andus, S; Nikolić, N; Dobričić, V; Marjanović, A; Gaćić, Z; Branković, G; Raković, M; Paunović, M, *Contribution to the knowledge on the distribution of freshwater sponges – the Danube and Sava rivers case study*, JOURNAL OF LIMNOLOGY **77** (2018) 199-208; DOI: 10.4081/jlimnol.2017.1677; eISSN: 1723-8633

**Рад 2.16.**

**I. Gutman, J. Tošović**

Testing the quality of molecular structure descriptors. Vertex-degree-based topological indices; *Journal of the Serbian Chemical Society*, **78** (2013) 805–810. DOI: 10.2298/JSC121002134G; ISSN: 0352-5139; IF = 0.889 за 2013. годину; 105/148; област: Chemistry, Multidisciplinary; Категорија: M23

**Цитиран је у:**

1. Ali, A; Bhatti, AA, *Extremal triangular chain graphs for bond incident degree (BID) indices*, ARS COMBINATORIA **141** (2018) 213-227; DOI:/; ISSN: 0381-7032
2. Gao, F; Zhao, DD; Li, XX; Liu, JB, *Graphs having extremal monotonic topological indices with bounded vertex k-partiteness*, JOURNAL OF APPLIED MATHEMATICS AND COMPUTING **58** (2018) 413-432; DOI: 10.1007/s12190-017-1151-y; ISSN: 1598-5865
3. Rodriguez, JM; Sanchez, JL; Sigarreta, JM, *CMMSE-on the first general Zagreb index*, JOURNAL OF MATHEMATICAL CHEMISTRY **56** (2018) 1849-1864; DOI: 10.1007/s10910-017-0816-y; ISSN: 0259-9791
4. Hayat, S; Wang, SH; Liu, JB, *Valency-based topological descriptors of chemical networks and their applications*, APPLIED MATHEMATICAL MODELLING **60** (2018) 164-178; DOI: 10.1016/j.apm.2018.03.016; ISSN: 0307-904X
5. Chen, XD; Hao, GL, *Extremal graphs with respect to generalized ABC index*, DISCRETE APPLIED MATHEMATICS **243** (2018) 115-124; DOI: 10.1016/j.dam.2018.01.013; ISSN: 0166-218X
6. Martinez-Perez, A; Rodriguez, JM, *New lower bounds for the second variable Zagreb index*, JOURNAL OF COMBINATORIAL OPTIMIZATION **36** (2018) 194-210; DOI: 10.1007/s10878-018-0293-7; ISSN: 1382-6905
7. Andrade-Ochoa, S; Garcia-Machorro, J; Bello, M; Rodriguez-Valdez, LM; Flores-Sandoval, CA; Correa-Basurto, J, *QSAR, DFT and molecular modeling studies of peptides from HIV-1 to describe their recognition properties by MHC-I*, JOURNAL OF BIOMOLECULAR STRUCTURE & DYNAMICS **36** (2018) 2312-2330; DOI: 10.1080/07391102.2017.1352538; ISSN: 0739-1102
8. Ahmad, M; Hussain, M; Saeed, M; Farooq, A, *On topological invariants of subdivided hex-derived network SIIDN 1(n)*, JOURNAL OF MATHEMATICAL ANALYSIS **9** (2018) 97-109; DOI:/; ISSN: 2217-3412

9. Zhong, LP, *The minimum harmonic index for unicyclic graphs with given diameter*, DISCUSSIONES MATHEMATICAE GRAPH THEORY **38** (2018) 429-442; DOI: 10.7151/dmgt.2007; ISSN: 1234-3099
10. Reti, T; Sharafldini, R; Dregelyi-Kiss, A; Haghbin, H, *Graph Irregularity Indices Used as Molecular Descriptors in QSPR Studies*, MATCH-COMMUNICATIONS IN MATHEMATICAL AND IN COMPUTER CHEMISTRY **79** (2018) 509-524; DOI: /; ISSN: 0340-6253
11. Ali, A; Bhatti, AA, *A note on the minimum reduced reciprocal Randic index of n-vertex unicyclic graphs*, KUWAIT JOURNAL OF SCIENCE **44** (2017) 27-33; DOI: /; ISSN: 2307-4108
12. Rada, J, *Vertex-degree-based topological indices of hexagonal systems with equal number of edges*, APPLIED MATHEMATICS AND COMPUTATION **296** (2017) 270-276; DOI: 10.1016/j.amc.2016.10.015, ISSN: 0096-3003
13. Dimitrov, D; Ikica, B; Skrekovski, R, *Remarks on the Graovac-Ghorbani index of bipartite graphs*, APPLIED MATHEMATICS AND COMPUTATION **293** (2017) 370-376; DOI: 10.1016/j.amc.2016.08.047; ISSN: 0096-3003
14. Cruz, R; Duque, F; Rada, J, *Extremal Values of the Number of Inlets and.. Number of Bay Regions over Pericondensed Hexagonal Systems*, MATCH-COMMUNICATIONS IN MATHEMATICAL AND IN COMPUTER CHEMISTRY **78** (2017) 469-486; DOI: /; ISSN: 0340-6253
15. Ali, A; Bhatti, AA, *A note on the augmented Zagreb index of cacti with fixed number of vertices and cycles*, KUWAIT JOURNAL OF SCIENCE **43** (2016) 11-17; DOI: /; ISSN: 2307-4108
16. Ali, A; Raza, Z; Bhatti, AA, *Extremal pentagonal chains with respect to bond incident degree indices*, CANADIAN JOURNAL OF CHEMISTRY **94** (2016) 870-876; DOI: 10.1139/cjc-2016-0308; ISSN: 0008-4042
17. Ali, A; Raza, Z; Bhatti, AA, *Bond incident degree (BID) indices of polyomino chains: A unified approach*, APPLIED MATHEMATICS AND COMPUTATION **287** (2016) 28-37; DOI: 10.1016/j.amc.2016.04.012; ISSN: 0096-3003
18. Ali, A; Bhatti, AA; Raza, Z, *The augmented Zagreb index, vertex connectivity and matching number of graphs*, BULLETIN OF THE IRANIAN MATHEMATICAL **42** (2016) 417-425; DOI: /; ISSN: 1735-8515
19. Ali, A; Raza, Z; Bhatti, AA, *On the augmented Zagreb index*, KUWAIT JOURNAL OF SCIENCE **43** (2016) 48-63; DOI: /; ISSN: 2307-4108
20. Jiao, L; Bing, S; Wang, XF; Xia, DH; Li, H, *Predicting the Aqueous Solubility of PCDD/Fs by using QSPR Method Based on the Molecular Distance-Edge Vector Index*, POLYCYCLIC AROMATIC COMPOUNDS **36** (2016) 527-543; DOI: 10.1080/10406638.2015.1028588; ISSN: 1040-6638
21. Das, KC; Mohammed, MA; Gutman, I; Atan, KA, *Comparison between Atom-Bond Connectivity Indices of Graphs*, MATCH-COMMUNICATIONS IN MATHEMATICAL AND IN COMPUTER CHEMISTRY **76** (2016) 159-170; DOI: /; ISSN: 0340-6253
22. Furtula, B, *Atom-Bond Connectivity Index Versus Graovac-Ghorbani Analog*, MATCH-COMMUNICATIONS IN MATHEMATICAL AND IN COMPUTER CHEMISTRY **75** (2016) 233-242; DOI: /; ISSN: 0340-6253
23. Deutsch, E; Klavzar, S, *M-Polynomial and Degree-Based Topological Indices*, IRANIAN JOURNAL OF MATHEMATICAL CHEMISTRY **6** (2015) 93-102; DOI: /; ISSN: 2228-6489

24. Cruz, R; Perez, T; Rada, J, *Extremal values of vertex-degree-based topological indices over graphs*, JOURNAL OF APPLIED MATHEMATICS AND COMPUTING **48** (2015) 395-406; DOI: 10.1007/s12190-014-0809-y; ISSN: 1598-5865
25. Jiao, L; Wang, XF; Bing, S; Xue, ZW; Li, H, *Predicting the boiling point of PCCD/Fs by QSPR method based on the molecular distance-edge vector index*, QUIMICA NOVA **38** (2015) 510-517; DOI: 10.5935/0100-4042.20150025; ISSN: 0100-4042
26. Betancur, C; Cruz, R; Rada, J, *Vertex-degree-based topological indices over starlike trees*, DISCRETE APPLIED MATHEMATICS **185** (2016) 18-25; DOI: 10.1016/j.dam.2014.12.021; ISSN: 0166-218X
27. Zhan, FQ; Qiao, YF; Cai, JL, *Unicyclic and bicyclic graphs with minimal augmented Zagreb index*, JOURNAL OF INEQUALITIES AND APPLICATIONS / (2015) 126; DOI: 10.1186/s13660-015-0651-2; ISSN: 1029-242X
28. Zhong, LP, *The harmonic index for unicyclic and bicyclic graphs with given matching number*, MISKOLC MATHEMATICAL NOTES **16** (2015) 587-605; DOI: /; ISSN: 1787-2405
29. Gutman, I; Furtula, B; Vukicevic, ZK; Popivoda, G, *On Zagreb Indices and Coindices*, MATCH-COMMUNICATIONS IN MATHEMATICAL AND IN COMPUTER CHEMISTRY **74** (2015) 5-16; DOI: /; ISSN: 0340-6253
30. Jiao, L; Wang, XF; Bing, S; Xue, ZW; Li, H, *QSPR study on the photolysis half-life of PCDD/Fs adsorbed on spruce (*Picea abies (L.) Karst.*) needle surfaces under sunlight irradiation by using a molecular distance-edge vector index*, RSC ADVANCES **5** (2015) 6617-6624; DOI: 10.1039/c4ra14178d; ISSN: 2046-2069
31. Nezhad, FF; Iranmanesh, A; Tehranian, A; Azari, M, *Strict lower bounds on the multiplicative Zagreb indices of graph operations*, ARS COMBINATORIA **117** (2014) 399-409; DOI: /; ISSN: 0381-7032
32. Azari, M, *Sharp lower bounds on the Narumi-Katayama index of graph operations*, APPLIED MATHEMATICS AND COMPUTATION **239** (2014) 409-421; DOI: 10.1016/j.amc.2014.04.088; ISSN: 0096-3003
33. Jiao, L; Gao, MM; Wang, XF; Li, H, *QSPR study on the octanol/air partition coefficient of polybrominated diphenyl ethers by using molecular distance-edge vector index*, CHEMISTRY CENTRAL JOURNAL **8** (2014) 36; DOI: 10.1186/1752-153X-8-36; ISSN: 1752-153X
34. Deng, QY; Chen, HY, *On extremal bipartite unicyclic graphs*, LINEAR ALGEBRA AND ITS APPLICATIONS **444** (2014) 89-99; DOI: 10.1016/j.laa.2013.11.038; ISSN: 0024-3795
35. Rada, J; Cruz, R, *Vertex-Degree-Based Topological Indices Over Graphs*, MATCH-COMMUNICATIONS IN MATHEMATICAL AND IN COMPUTER CHEMISTRY **72** (2014) 603-616; DOI: /; ISSN: 0340-6253
36. Gutman, I; Furtula, B; Elphick, C, *Three New/Old Vertex-Degree-Based Topological Indices*, MATCH-COMMUNICATIONS IN MATHEMATICAL AND IN COMPUTER CHEMISTRY **72** (2014) 617-632; DOI: /; ISSN: 0340-6253
37. Hamzeh, A; Reti, T, *An Analogue of Zagreb Index Inequality Obtained from Graph Irregularity Measures*, MATCH-COMMUNICATIONS IN MATHEMATICAL AND IN COMPUTER CHEMISTRY **72** (2014) 669-683; DOI: /; ISSN: 0340-6253
38. Rada, J; Cruz, R; Gutman, I, *Benzoid Systems with Extremal Vertex-Degree-Based Topological Indices*, MATCH-COMMUNICATIONS IN MATHEMATICAL AND IN COMPUTER CHEMISTRY **72** (2014) 125-136; DOI: /; ISSN: 0340-6253

39. Gomes, H; Gutman, I; Martins, EA; Robbiano, M; San Martin, B, *On Randic Spread*, MATCH-COMMUNICATIONS IN MATHEMATICAL AND IN COMPUTER CHEMISTRY **72** (2014) 249-266; DOI: /; ISSN: 0340-6253
40. Gutman, I, *Degree-Based Topological Indices*, CROATICA CHEMICA ACTA **86** (2013) 351-361; DOI: 10.5562/cca2294; ISSN: 0011-1643
41. Rada, J, *Ordering catacondensed hexagonal systems with respect to VDB topological indices*, REVISTA DE MATEMÁTICA TEORÍA Y APLICACIONES **23** (2016) 277-289; DOI: /; ISSN: 1409-2433
42. Vukičević, D; Li, Q; Sedlar, J; Došlić, T, *Lanzhou index*, MATCH-COMMUNICATIONS IN MATHEMATICAL AND IN COMPUTER CHEMISTRY **80** (2018) 863-876; DOI: /; ISSN: 0340-6253
43. Deutsch, E; Klavžar, S, *M-polynomial revisited: Bethe cacti and an extension of Gutman's approach*, JOURNAL OF APPLIED MATHEMATICS AND COMPUTING / (2018) 1-12; DOI: 10.1007/s12190-018-1212-x; ISSN: 1598-5865
44. Rada, J, *The zig-zag chain as an extremal value of VDB topological indices of polyomino chains*, JOURNAL OF COMBINATORIAL MATHEMATICS AND COMBINATORIAL COMPUTING **96** (2016) 103-111; DOI: /; ISSN: 0835-3026
45. Yousefi, A; Iranmanesh, A; Tehranian, A, *Computation of forgotten topological index of some nanostructures*, JOURNAL OF COMPUTATIONAL AND THEORETICAL NANOSCIENCE **13** (2016) 9145-9150; DOI: 10.1166/jctn.2016.6295; ISSN: 1546-1955
46. Cruz, R; Rada, J, *Extremal polyomino chains of VDB topological indices*, APPLIED MATHEMATICAL SCIENCES **9** (2015) 5371-5388; DOI: 10.12988/ams.2015.54368; ISSN: 1314-7552
47. Rada, J, *The linear chain as an extremal value of VDB topological indices of polyomino chains*, APPLIED MATHEMATICAL SCIENCES **8** (2014) 5133-5143; DOI: 10.12988/ams.2014.46507; ISSN: 1314-7552
48. Hosseini, SA; Ahmadi, MB; Gutman, I, *Kragujevac trees with minimal atom-bond connectivity index*, MATCH-COMMUNICATIONS IN MATHEMATICAL AND IN COMPUTER CHEMISTRY **71** (2014) 5-20; DOI: /; ISSN: 0340-6253
49. Furtula, B; Gutman, I; Das, KC; Source, G, *On atom-bond connectivity molecule structure descriptors*, JOURNAL OF THE SERBIAN CHEMICAL SOCIETY **81** (2016) 271-276 DOI: 10.2298/JSC150901093F; ISSN: 0352-5139
50. Zhong, LP; Cui, Q, *The Harmonic Index for Unicyclic Graphs with Given Girth*, FILOMAT **29** (2015) 673-686; DOI: 10.2298/FIL1504673Z; ISSN: 0354-5180
51. Jiao, L; Wang, XF; Li, H; Wang, YX, *QSPR study on the gas/particle partition coefficient of polychlorinated biphenyls using the molecular distance-edge vector index*, JOURNAL OF THE SERBIAN CHEMICAL SOCIETY **79** (2014) 965-975 DOI: 10.2298/JSC130611152J; ISSN: 0352-5139
52. Gutman, I; Zhong, LP; Xu, KX, *Relating the ABC and harmonic indices*, JOURNAL OF THE SERBIAN CHEMICAL SOCIETY **79** (2014) 557-563; DOI: 10.2298/JSC130930001G; ISSN: 0352-5139
53. Cruz, R; Gutman, I; Rada, J, *On benzenoid systems with a minimal number of inlets*, JOURNAL OF THE SERBIAN CHEMICAL SOCIETY **78** (2013) 1351-1357; DOI: 10.2298/JSC130218033C; ISSN: 0352-5139

#### **Д. Мишљење и предлог комисије**

Комисија је једногласно оценила научне резултате као значајан допринос у области Физичке органске хемије, конкретно, за теоријско и експериментално испитивање различитих физичко-хемијских особина и реакција природних полифенолих једињења, са посебним освртом на термодинамичко и кинетичко испитивање антиоксидативних особина и механизма дејства ових једињења. Такође, бавила се и испитивањем тополошких индекса изомерних алканова, као и истраживањима која су се односила на испитивање ароматичности полицикличних угљоводоника.

Др Јелена Тошовић је до сада објавила шеснаест научних радова у познатим часописима међународног значаја (три рада из категорије M21a, два рада из категорије M21, 5 радова из категорије M22 и шест радова из категорије M23), шест радова објављених у националним часописима (два рада из категорије M51 и четири рада из категорије M53), три саопштења на међународним конференцијама штампана у целини (M33), четири саопштења на међународним конференцијама штампана у изводу (M34), по једно саопштење на националним конференцијама штампана у целини (M63) и у изводу (M64) и имала је једно предавање по позиву на међународној научној конференцији штампано у изводу (M32). Укупна вредност фактора M за до сада постигнуте резултате износи 110,7, док нормирани M фактор износи 103,21. Укупна вредност импакт фактора (IF) објављених научних радова је 37,508.

Имајући у виду целокупне научне резултате др Јелене Тошовић, њену научну компетентност за избор у звање научни сарадник карактеришу следеће вредности индикатора:

| Ознака групе | Укупан број радова | Вредност индикатора | Укупна вредност/*нормирана вредност |
|--------------|--------------------|---------------------|-------------------------------------|
| M21a         | 3                  | 10                  | 30                                  |
| M21          | 2                  | 8                   | 16/*14,67                           |
| M22          | 5                  | 5                   | 25/*24,17                           |
| M23          | 6                  | 3                   | 18/*12,67                           |
| M32          | 1                  | 1,5                 | 1,5                                 |
| M33          | 3                  | 1                   | 3                                   |
| M34          | 4                  | 0,5                 | 2                                   |
| M51          | 2                  | 2                   | 4                                   |
| M53          | 4                  | 1                   | 4                                   |
| M63          | 1                  | 1                   | 1                                   |
| M64          | 1                  | 0,2                 | 0,2                                 |
| M70          | 1                  | 6                   | 6                                   |

Укупни поени /\*нормирани поени: 110,7\*103,21

**КРИТЕРИЈУМИ ЗА ИЗБОР У НАУЧНО ЗВАЊЕ НАУЧНИ САРАДНИК**

| Потребан услов   | Остварено (Нормирано)   |
|--|---|
| Укупно: 16   | Укупно: 110,7/*103,21   |
| $M_{10}+M_{20}+M_{31}+M_{32}+M_{33}+M_{41}+M_{42} \geq 10$ | $M_{10}+M_{20}+M_{31}+M_{32}+M_{33}+M_{41}+M_{42} = 93,5 \text{ (86,01)}$ |
| $M_{11}+M_{12}+M_{21}+M_{22}+M_{23}+M_{24} \geq 5$         | $M_{11}+M_{12}+M_{21}+M_{22}+M_{23}+M_{24} = 89 \text{ (81,51)}$          |

На основу свега изложеног може се донети следећи:

### Б. Закључак

На основу анализе приложене документације, увиђа се да је др Јелена Тошовић својим досадашњим научно-истраживачким радом дала значајан оригинални научни допринос у области Физичке органске хемије. Одбранила је докторску дисертацију из те области и до сада је објавила шеснаест научних радова у познатим часописима међународног значаја (три рада из категорије M21a, два рада из категорије M21, 5 радова из категорије M22 и шест радова из категорије M23), шест радова објављених у националним часописима (два рада из категорије M51 и четири рада из категорије M53), три саопштења на међународним конференцијама штампана у целини (M33), четири саопштења на међународним конференцијама штампана у изводу (M34), по једно саопштење на националним конференцијама штампана у целини (M63) и у изводу (M64) и имала је једно предавање по позиву на међународној научној конференцији штампано у изводу (M32).

Имајући у виду целокупне научне резултате др Јелене Тошовић, њену научну компетентност за избор у звање научни сарадник за научну област хемија карактерише укупна вредност M фактора од 110,7, док нормирани M фактор износи 103,21. Укупна вредност импакт фактора (IF) објављених научних радова је 37,508. Њени радови су цитирани, искључујући аутоцитате, 124 пута према базама података (*Web of Science* и *Scopus*). Показала је изузетан смисао и способност за самостално бављење научно-истраживачким радом у области Физичке органске хемије. Одликују је жеља за усавршавањем и стицањем нових знања. Поред тога, др Јелена Тошовић стечено знање са успехом преноси на студенте и млађе колеге. Др Јелена Тошовић има изузетно успешну сарадњу са колегама из земље и иностранства. Резултат сарадње су радови и истраживачки боравци кандидата који су значајно допринели њеном усавршавању.

На основу претходно изнетих чињеница, а у складу са **Законом о научно-истраживачкој делатности** може се закључити да је др Јелена Тошовић, испунила све услове за избор у звање *научни сарадник за научну област Хемија*. Сходно томе, са задовољством предлажемо Наставно-научном већу Природно-математичког факултета у Крагујевцу да прихвати предлог за избор кандидата др Јелене Тошовић у научно звање *научни сарадник за научну област Хемија* и упути га надлежној комисији Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије.

У Крагујевцу и Београду,

**Чланови комисије**

Датум: 16.05.2019.г.

*С. Марковић*

- 
1. др Светлана Марковић, редовни професор – председник Комисије

Природно-математички факултет, Универзитет у Крагујевцу

Ужа научна област: Физичка хемија

*З. Петровић*

- 
2. др Зорица Петровић, редовни професор – члан Комисије

Природно-математички факултет, Универзитет у Крагујевцу

Ужа научна област: Органска хемија

*Ј. Димитрије Марковић*

- 
3. др Јасмина Димитрије Марковић, редовни професор – член Комисије

Факултет за физичку хемију, Универзитет у Београду

Ужа научна област: Физичка хемија - спектрохемија