

Инадж сима
Димитриј

24.08.2020

03 330/1 - -

НАСТАВНО-НАУЧНОМ ВЕЋУ
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКОГ ФАКУЛТЕТА
И СТРУЧНОМ ВЕЋУ ЗА ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКЕ НАУКЕ
УНИВЕРЗИТЕТА У КРАГУЈЕВЦУ

На седници Наставно-научног већа Природно-математичког факултета у Крагујевцу, одржаној 24. јуна 2020. године (број одлуке: 260/XII-1), предложени смо, а на седници Већа за природно-математичке науке Универзитета у Крагујевцу одржаној 15. јула 2020. године (број одлуке: IV-01-466/15), именовани смо за чланове комисије за подношење извештаја за оцену научне заснованости теме и испуњености услова кандидата за израду докторске дисертације под насловом: **"КОМПАРАТИВНО ИСПИТИВАЊЕ МОЛЕКУЛСКИХ ДЕСКРИПТОРА ЗАСНОВАНИХ НА СОПСТВЕНИМ ВРЕДНОСТИМА"**, кандидата Изудина Рецеповића, мастер хемичара, студента докторских студија хемије. На основу података којима располажемо подносимо следећи

И З В Е Ш Т А Ј

1. Научни приступ проблему предложеног нацрта докторске дисертације и процена научног доприноса крајњег исхода рада

Тврђа да информације садржане у молекулској структури одређују физичко-хемијске особине јединења представља једну од парадигми модерне хемије. Иако ова веза може каткад изгледати логично и природно, неретко ју је тешко идентификовати и објаснити. Прикупљање и манипулација информацијама, изведеним из молекулске структуре, омогућена је употребом молекулских дескриптора. Молекулски дескриптор представља број или скуп бројева који носе информацију о карактеристичним структурним детаљима у молекулу. Данас је доступан огроман број ових дескриптора који се користе за различите сврхе. Разликују се по количини и комплексности информација коју носе, што утиче на сложеност алгоритама, а самим тим и на време, за њихово рачунање.

У оквиру предложене докторске дисертације, предвиђено је упоредно испитивање молекулских дескриптора заснованих на сопственим вредностима матрице суседства. У ову групу тополошких молекулских дескриптора спадају енергија графа, Естрадин

индекс и резолвентна енергија. Прва два тополошка индекса су већ дуги низ година присутни у науци и њихова примена у хемији је демонстрирана у низу радова, а њихове особине су детаљно испитиване. Трећи тополошки индекс из ове групе је недавно уведен и његово подробно изучавање тек предстоји. Дефиниције ових тополошких молекулских дескриптора, засноване на истим графовским параметрима, изискују упоредно испитивање са циљем да се пронађу сличности и разлике у њиховом понашању приликом екстракције структурних информација из молекула. Међутим, таква студија до данас није урађена и ова докторска дисертација би требало да попуни ту празнину. Добијени резултати ће допринети бољем разумевању горе-поменутих молекулских дескриптора, њихове осетљивости на поједине структурне детаље у молекулу, и напослетку, детерминисање зависности физичко-хемијских особина једињења од молекулске структуре. Ова дисертација ће представљати и значајан подстицај за примене ових дескриптора у различитим областима хемије.

Веза са досадашњим истраживањима

Предмет истраживања кандидата Изудина Реџеповића су тополошки молекулски дескриптори. Кандидат је део истраживачке групе која се дуги низ година бави испитивањем особина и применама тополошких молекулских дескриптора. Истраживања у оквиру ове докторске дисертације су саставни део истраживања која финансира Министарство просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије. Рад у оквиру ове тезе омогућиће кандидату континуитет у раду и допринеће бољем познавању тополошких молекулских дескриптора заснованим на сопственим вредностима.

2. Образложение предмета, метода и циља који уверљиво упућују да је предложена тема од значаја за развој науке

Предмет, циљеви и хипотезе ове дисертације обухватају следеће:

- Енергија графа, Естрадин индекс и резолвентна енергија су молекулски дескриптори засновани на сопственим вредностима матрице суседства. Ова чињеница наводи на помисао да међу њима постоје одређене релације.
- Испитивања ових релација биће вршена на графовским моделима угљоводоника. Посебна пажња биће усмерена на трагање за структурним детаљима који утичу на релације међу овим дескрипторима.
- Упоредном анализом биће показано који од ових дескриптора показује већу предикциону моћ. Тестирање ће бити вршено за неколико физичко-хемијских особина једињења.

- Способност разликовања изомера биће откријена тестирањем дискриминативне моћи ових тополошких молекулских дескриптора.
- Испитивање структурне осетљивости даће одговор на питање да ли ови дескриптори могу и у којој мери, да препознају мале промене у структури молекула.
- Присуство цикла у структури молекула и његов утицај на вредност енергије графа, Естрадиног индекса и резолвентне енергије биће посебно испитан.

Методе истраживања

У оквиру ових истраживања користиће се графовски модели угљоводоника. Одређивање модела који повезују ова три молекулска дескриптора са физичко-хемијским особинама једињења, као и оних који приказују релације међу њима, биће добијени користећи статистичке методе, првенствено вишеструку линеарну регресију. Они ће бити развијени коришћењем модула за машинско учење, као што је scikit-learn модул. За ове потребе биће написани посебни Питон програми. Сви модели биће тестирали на више нивоа уз помоћ хемометријских и статистичких тестова. Тестирање осетљивости ових молекулских дескриптора биће вршено, уз употребу доступног алгоритма, на одређеним класама изомера угљоводоника.

Оквирни садржај докторске дисертације

Докторска дисертација биће тематска целина састављена из делова. У уводом делу под називом Општи део биће представљени тополошки молекулски дескриптори, њихова подела и приказ недавних резултата из дате области истраживања. У посебном делу биће представљени енергија графа, Естрадин индекс и резолвентна енергија. Потом ће бити представљена методологија испитивања тополошких молекулских дескриптора заснованих на сопственим вредностима. У делу Резултати и дискусија биће детаљно представљени и дискутовани остварени резултати у оквиру докторске дисертације. У завршном делу под називом Закључци биће представљени закључци који проистичу из остварених резултата. На крају ће бити дат списак коришћених референци у оквиру дисертације под називом Литература.

3. Образложење теме за израду докторске дисертације које омогућава закључак да је у питању оригинална идеја или оригиналан начин анализирања проблема

Увидом у научна истраживања и резултате кандидата Изудина Рецеповића, комисија закључује да је предложена тема докторске дисертације **"КОМПАРАТИВНО ИСПИТИВАЊЕ МОЛЕКУЛСКИХ ДЕСКРИПТОРА ЗАСНОВАНИХ НА СОПСТВЕНИМ ВРЕДНОСТИМА"** оригинална идеја.

4. Усклађеност дефиниције предмета истраживања, основних појмова, предложене хипотезе, извора података, методе анализе са критеријумима науке уз поштовање научних принципа у изради коначне верзије докторске дисертације

Квантификациовање молекулске структуре омогућено је употребом молекулских дескриптора. Посебан значај молекулских дескриптора се огледа у њиховој примени за конструисање модела за предвиђање физичко-хемијских особина и активности једињења. Ови модели су посебно корисни приликом дизајна нових лекова и материјала. Испитивања у оквиру ове докторске дисертације се фокусирају на молекулске дескрипторе засноване на сопственим вредностима. Остварени резултати ће допринети бољем познавању ове класе дескриптора. Један од главних резултата дисертације биће одређивање нивоа, врсте и квалитета информација које ова врста дескриптора прикупља из молекулске структуре. Да би се проценила примењивост енергије графа, Естрадиног индекса и резолвентне енергије за моделирање физичко-хемијских особина, биће конструисани предикциони модели за тачку кључана, енталпију образовања и партициони коефицијент (октанол/вода) угљоводоника. Испитивањем утицаја структурних детаља на дескриптор биће откривено коју врсту структурне информације ови дескриптори носе. Ови резултати омогућиће упознавање предности и мана ових дескриптора и евентуално отворити могућност за дефинисање новог дескриптора заснованог на сопственим вредностима матрице суседства са побољшаним перформансама у односу на постојеће.

5. Предложени ментор израде докторске дисертације

Институт за хемију Природно-математичког факултета Универзитета у Крагујевцу је за ментора ове докторске дисертације предложио др Бориса Фуртулу, ванредног професора Природно-математичког факултета у Крагујевцу.

Образложение: Др Борис Фуртула се бави истраживањима из уже научне области Физичка хемија, и до сада има преко 120 публикованих радова у реномираним часописима са SCI листе, преко 15 радова у националним часописима и 12 поглавља у научним монографијама. Био је коурредник осам научних монографија. Др Борис Фуртула се бави испитивањем особина и применама тополошких молекулских дескриптора. На основу горе наведеног, сматрамо да др Борис Фуртула испуњава све услове за ментора ове докторске дисертације.

Научна област докторске дисертације

Предложена докторска дисертација припада ужој научној области Органска хемија.

Научна област чланова комисије

Чланови комисије се баве истраживањем у областима Физичке хемије, Органске хемије и Биохемије. Др Борис Фуртула је ванредни професор на Природно-математичком факултету у Крагујевцу. Др Иван Гутман (председник комисије) је професор емеритус на Природно-математичком факултету у Крагујевцу и редовни члан САНУ. Др Светлана Марковић је редовни професор на Природно-математичком факултету у Крагујевцу. Др Славко Раденковић је ванредни професор на Природно-математичком факултету у Крагујевцу. Др Биљана Арсић је научни сарадник на Природно-математичком факултету у Нишу.

6. Кратка биографија кандидата

Изудин Рецеповић је рођен 26. 12. 1993. године у Новом Пазару. Основне академске студије хемије је завршио 2016. године на Департману за хемијско-технолошке науке, Државног универзитета у Новом Пазару са просечном оценом 9,54 под менторством проф. др Зорана Марковића. Мастер академске студије је завршио 2017. године на Природно-математичком факултету, Универзитета у Крагујевцу са просечном оценом 10,00 под менторством проф. др Светлане Марковић. Наслов мастер рада је "Антioxидативна активност кафеинске киселине-механистичка DFT студија". Докторске академске студије је уписао школске 2017/2018. године на Природно-математичком факултету у Крагујевцу. Тренутно је на трећој години студија и положио је све предвиђене испите са просечном оценом 10,00. Кандидат учествује у извођењу практичне наставе предмета из области теоријске и компјутерске хемије. Течно говори енглески језик.

7. Преглед научно-истраживачког рада кандидата

Кандидат до сада има 10 публикованих/прихваћених радова у часописима са SCI листе, 1 рад у националном часопису међународног значаја, 1 рад у врхунском часопису националног значаја и 1 рад у часопису националног значаја. Поред тога кандидат има и два саопштења на међународним конференцијама штампаним у изводу и једно саопштење на националној конференцији штампано у изводу. Међу радовима публикованим у часописима са SCI листе, 5 радова је у врхунским часописима међународног значаја (M21), један рад у истакнутом међународном часопису (M22), а осталих четири рада је у часописима међународног значаја (M23). Кандидат је први аутор на 7 радова који су штампани у часописима са SCI листе.

Списак публикација кандидата

Научни радови публиковани у врхунским часописима међународног значаја (М21)

1. Izudin Redžepović, Boris Furtula, Predictive potential of eigenvalue-based topological molecular descriptors, *J. Comput. Aided Mol. Des.* **34** (2020) 975–982.
DOI: 10.1007/s10822-020-00320-2
ISSN: 1573-4951
(ИФ=3,250 за 2018. годину, 30/106, област: Computer Science, Interdisciplinary Applications)
2. Izudin Redžepović, Boris Furtula, On degeneracy of \mathcal{A} -eigenvalue-based molecular descriptors and r -equienergetic chemical trees, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **84** (2020) 385–397.
http://match.pmf.kg.ac.rs/electronic_versions/Match84/n2/match84n2_385-397.pdf
ISSN: 0340-6253
(ИФ=2,126 за 2018. годину, 29/105, област: Mathematics, Interdisciplinary Applications)
3. Izudin Redžepović, Yaping Mao, Zhao Wang, Boris Furtula, Steiner degree distance indices: Chemical applicability and bounds, *Int. J. Quantum Chem.* **120** (2020) #e26209.
DOI: 10.1002/qua.26209
ISSN: 1097-461X
(ИФ=2,263 за 2018. годину, 25/105, област: Mathematics, Interdisciplinary Applications)
4. Izudin Redžepović, Boris Furtula, Ivan Gutman, Relating total π -electron energy of benzenoid hydrocarbons with HOMO and LOMO energies, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **84** (2020) 229–237.
http://match.pmf.kg.ac.rs/electronic_versions/Match84/n1/match84n1_229-237.pdf
ISSN: 0340-6253
(ИФ=2,126 за 2018. годину, 29/105, област: Mathematics, Interdisciplinary Applications)
5. Izudin Redžepović, Svetlana Marković, Boris Furtula, On structural dependence of enthalpy of formation of catacondensed benzenoid hydrocarbons, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **82** (2019) 663–678.
http://match.pmf.kg.ac.rs/electronic_versions/Match82/n3/match82n3_663-678.pdf
ISSN: 0340-6253
(ИФ=2,126 за 2018. годину, 29/105, област: Mathematics, Interdisciplinary Applications)

Научни радови публиковани у истакнутим међународним часописима (М22)

6. Svetlana Marković, Izudin Redžepović, Boris Furtula, Dependence of the enthalpy of formation of phenols on molecular structure – semiempirical study, *Polycycl. Aromat. Compd.* прихваћен за штампу.
DOI: 10.1080/10406638.2019.1696379
ISSN: 1563-5333
(ИФ=1,894 за 2019. годину, 33/57, област: Chemistry, Organic)

Научни радови публиковани у међународним часописима (М23)

7. **Izudin Redžepović**, Boris Furtula, On relationships of eigenvalue-based topological molecular descriptors, *Acta Chim. Slov.* **67** (2020) 312–318.
DOI: 10.17344/acsi.2019.5520
ISSN: 1580–3155
(ИФ=1,263 за 2019. годину, 132/177, област: Chemistry, Multidisciplinary)
8. **Izudin Redžepović**, Svetlana Marković, Theoretical study on the heat of formation of some polycyclic aromatic hydrocarbons, *Chem. Pap.* **74** (2020) 829–836.
DOI: 10.1007/s11696-019-00914-7
ISSN: 2585–7290
(ИФ=1,680 за 2019. годину, 117/177, област: Chemistry, Multidisciplinary)
9. Ivan Gutman, **Izudin Redžepović**, Boris Furtula, Two stability criteria for benzenoid hydrocarbons and their relation, *Croat. Chem. Acta* **92** (2019) 473–475.
DOI: 10.5562/cca3593
ISSN: 0011–1643
(ИФ=0,731 за 2018. годину, 145/172, област: Chemistry, Multidisciplinary)
10. Ana Gligorijević, Svetlana Marković, **Izudin Redžepović**, Boris Furtula, Application of spectral graph theory on the enthalpy change of formation of acyclic saturated ketones, *J. Serb. Chem. Soc.* **83** (2018) 1339–1349.
DOI: 10.2298/JSC180906086G
ISSN 0352–5139
(ИФ=0,828 за 2018. годину, 140/172, област: Chemistry, Multidisciplinary)

Научни радови публиковани у националним часописима међународног значаја (М24)

1. **Izudin Redžepović**, Boris Furtula, Resolvent energy and Estrada index of benzenoid hydrocarbons, *J. Serb. Soc. Comput. Mech. special issue* (2020) 37–44.
DOI: 10.24874/jsscm.2020.01.04
ISSN: 2620–1941

Научни радови публиковани у врхунским часописима националног значаја (М51)

1. **Izudin Redžepović**, Svetlana Marković, Jelena Tošović, Antioxidative activity of caffeic acid – mechanistic DFT study, *Kragujevac J. Sci.* **39** (2017) 109–122.
DOI: 10.5937/KgJSci1739109R
ISSN: 1450–9636

Научни радови публиковани у часописима националног значаја (М53)

1. Светлана Марковић, Слађана Ђорђевић, Изудин Реджеповић, Жико Милановић, Симулирање хемијских спектара помоћу софтвера за молекулско моделирање, *Хемијски преглед* **60** (2019) 90–95.
ISSN: 0440–6826

Научна саопштења на међународним конференцијама штампана у изводу (М34)

1. Izudin Redžepović, Svetlana Marković, Boris Furtula, Graph theory based model for the enthalpy of formation of benzenoid hydrocarbons, *8th International Conference on Computational Bioengineering (ICCB)*, September 4–6, Belgrade, Serbia, T.4.6, ICCB 2019 Proceedings ISBN: 978-86-81037-75-1.
2. Izudin Redžepović, Svetlana Marković, Jelena Tošović, Theoretical investigation of antioxidative activity of caffeic acid, *4th South-East European Conference on Computational Mechanics (SEECCM)*, Kragujevac, July 03–04, 2017, T.2.1., 24. Book of abstracts ISBN: 978-86-921243-0-3.

Научна саопштења на националним конференцијама штампана у изводу (М64)

1. Ana Gligorijević, Svetlana Marković, Izudin Redžepović, Boris Furtula, Dependence of ΔH_f of ketones on structural properties—computational modeling, *Sixth Conference of Young Chemists of Serbia*, Belgrade, 27th October 2018, TH06 PE 5. Book of abstracts ISBN 978-86-7132-072-6.

ЗАКЉУЧАК

Изудин Рецеповић има звање мастер хемичара које је стекао на Природно-математичком факултету, Универзитета у Крагујевцу. Школске године 2017/2018. године је уписао докторске академске студије на истом факултету, на студијској групи хемија и све испите прописане планом и програмом студија је положио са просечном оценом 10. Кандидат активно ради на изради докторске дисертације. Објавио је десет радова у часописима са SCI листе и три рада у националним часописима. Четири рада се директно односе на истраживања предложена у оквиру теме докторске дисертације (два из категорије М21, један из категорије М23 и један из категорије М24). На основу свега изложеног комисија закључује да је предложена тема докторске дисертације

”КОМПАРАТИВНО ИСПИТИВАЊЕ МОЛЕКУЛСКИХ ДЕСКРИПТОРА ЗАСНОВАНИХ НА СОПСТВЕНИМ ВРЕДНОСТИМА”

оригинална и значајна са научне тачке гледишта. Такође, сматрамо да кандидат Изудин Рецеповић испуњава све услове за успешан рад и реализацију наведене теме. За ментора докторске дисертације се предлаже др Борис Фуртула, ванредни професор Природно-математичког факултета, Универзитета у Крагујевцу.

У Крагујевцу и Нишу, 10. август 2020. године.

КОМИСИЈА

Др Борис Фуртула, ванредни професор
-предложени ментор-
Природно-математички факултет
Универзитет у Крагујевцу
Ужа научна област: Физичка хемија

Др Иван Гутман, професор емеритус
и редовни члан САНУ
-председник комисије-
Природно-математички факултет
Универзитет у Крагујевцу
Ужа научна област: Физичка хемија

Др Светлана Марковић, редовни професор
-члан комисије-
Природно-математички факултет
Универзитет у Крагујевцу
Ужа научна област: Физичка хемија

Др Славко Раденковић, ванредни професор
-члан комисије-
Природно-математички факултет
Универзитет у Крагујевцу
Ужа научна област: Физичка хемија

Др Биљана Арсић, научни сарадник
-члан комисије-
Природно-математички факултет
Универзитет у Нишу
Ужа научна област: Органска хемија и Биохемија