

Универзитет у Крагујевцу
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ

Број: 6/95
11. 03. 2022. године
Крагујевац

На основу члана 82 став 2 Закона о науци и истраживањима и члана 114 став 2, 152 став 1 и 158 Статута Факултета по поднетом извештају комисије ради спровођења поступка за избор у научно звање број 03-38/15-1 од 10.03.2022. године, Декан Факултета дана 11. 03. 2022. године, донео је следећу

О Д Л У К У

Ставља се на увид јавности у трајању од 30 дана објављивањем у PDF формату на интернет страници Факултета електронска верзија Извештаја комисије о утврђивању предлога за избор кандидата др **Изудина Реџеповића** у научно звање **Научни сарадник**.

За реализацију ове одлуке задужују се Продекан за наставу и техничко-информатичка служба Факултета.


ДЕКАН
М. Станић
Проф. др Марија Станић

Д-но:

- продекану за наставу,
- техничко-информатичкој служби,
- ННВ-у Факултета,
- архиви.

УНИВЕРЗИТЕТ У КРАГУЈЕВЦУ
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКОГ ФАКУЛТЕТА

ПРИЈЕМА	10.05.2022		
03	38/15-1	-	-

НАСТАВНО-НАУЧНОМ ВЕЋУ
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКОГ ФАКУЛТЕТА
УНИВЕРЗИТЕТА У КРАГУЈЕВЦУ

Поштоване колегинице и колеге,

одлуком Наставно-научног већа Природно-математичког факултета у Крагујевцу од 26. јануара 2022. године (број одлуке: 60/X-1), именовани смо за чланове комисије за писање извештаја о испуњености услова др **Изудина Реџеповића** за стицање научног звања **научни сарадник**, за научну област **Хемија**. Сагласно критеријумима за стицање научних звања, утврђеним *Правилником о њостујку, начину вредновања и квантитативном исказивању научноистраживачких резултата истаживача* надлежног Министарства и *Законом о научноистраживачкој делатности*, на основу података којима располаже, комисија подноси следећи

ИЗВЕШТАЈ

А. Биографски подаци

Др **Изудин Реџеповић** је рођен 26. децембра 1993. године у Новом Пазару. Основне академске студије хемије је завршио 2016. године на Државном универзитету у Новом Пазару са просечном оценом 9,54. Мастер академске студије хемије је завршио 2017. године на Природно-математичком факултету, Универзитета у Крагујевцу са просечном оценом 10,00 под менторством проф. др Светлане Марковић. Наслов магистар рада је "Антиоксидативна активност кафеинске киселине – механистичка DFT студија". Докторске академске студије хемије је завршио 28. децембра 2021. године на Природно-математичком факултету у Крагујевцу одбраном докторске дисертације "Компаративно испитивање молекулских дескриптора заснованих на сопственим вредностима", под менторством проф. др Бориса Фуртуле. Кандидат учествује у извођењу практичне наставе предмета из области теоријске и компјутерске хемије. Течно говори енглески језик.

Б. Библиографија

Др **Изудин Реџеповић** се активно бави научним истраживањима у области теоријске хемије. Предмет његових досадашњих испитивања су тополошки молекулски дескриптори. Кандидат има више научних радова који су публиковани у часо-

писима међународног и националног значаја. Такође, кандидат је резултате научно-истраживачког рада презентовао на неколико међународних и националних научних скупова. Кандидат је први аутор на 11 радова публикованих у часописима са SCI листе.

1. Одбрањена докторска дисертација (M70)

Изудин Х. Реџеповић, "Компаративно испитивање молекулских дескриптора заснованих на сопственим вредностима", Природно-математички факултет, Универзитет у Крагујевцу, Крагујевац, 2021. **6 поена**

2. Списак научних радова

Радови публиковани у међународним часописима изузетних вредности (M21a)

- 2.1 Boris Furtula, Slavko Radenković, **Izudin Redžepović**, Niko Tratnik, Petra Žigert Pleteršek, The generalized Zhang–Zhang polynomial of benzenoid systems – theory and applications, *Appl. Math. Comput.* **418** (2022) 126822.

DOI: 10.1016/j.amc.2021.126822

ISSN: 0096–3003

(ИФ=4,091 за 2020. годину, 7/265, област: Mathematics, Applied) **7,14 поена**

Радови публиковани у врхунским часописима међународног значаја (M21)

- 2.2 Svetlana Marković, **Izudin Redžepović**, Boris Furtula, Dependence of the enthalpy of formation of phenols on molecular structure – semiempirical study, *Polycycl. Aromat. Comp.* **41** (2021) 1755–1766.

DOI: 10.1080/10406638.2019.1696379

ISSN: 1040–6638

(ИФ=3,744 за 2020. годину, 15/57, област: Chemistry, Organic) **8 поена**

- 2.3 **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: 0920–654X

(ИФ=3,250 за 2018. годину, 30/106, област: Computer Science, Interdisciplinary Applications) **8 поена**

- 2.4 **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.

https://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) **8 поена**

- 2.5 **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: 0020-7608
(ИФ=2,263 за 2018. годину, 25/105, област: Mathematics, Interdisciplinary Applications) **6,67 поена**
- 2.6 **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.
https://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) **8 поена**
- 2.7 **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.
https://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) **8 поена**

Радови публиковани у истакнутим међународним часописима (M22)

- 2.8 Slavko Radenković, **Izudin Redžepović**, Slađana Đorđević, Boris Furtula, Niko Tratnik, Petra Žigert Pleteršek, Relating vibrational energy with Kekulé- and Clar-structure-based parameters, *Int. J. Quantum Chem.* **122** (2022) e26867.
DOI: 10.1002/qua.26867
ISSN: 0020-7608
(ИФ=2,444 за 2020. годину, 41/108, област: Mathematics, Interdisciplinary Applications) **3,12 поена**
- 2.9 **Izudin Redžepović**, Ivan Gutman, Comparing energy and Sombor energy – an empirical study, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* прихваћен за штампу.
ISSN: 0340-6253
(ИФ=2,497 за 2020. годину, 38/108, област: Mathematics, Interdisciplinary Applications) **5 поена**
- 2.10 Ivan Gutman, **Izudin Redžepović**, Boris Furtula, Ali Mohammed Sahal, Energy of graphs with self-loops, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **87** (2022) 645-652.
DOI: 10.46793/match.87-3.645G
ISSN: 0340-6253
(ИФ=2,497 за 2020. годину, 38/108, област: Mathematics, Interdisciplinary Applications) **4,17 поена**

- 2.11 **Izudin Redžepović**, Slavko Radenković, Boris Furtula, Effect of a ring onto values of eigenvalue—based molecular descriptors, *Symmetry* **13** (2021) #1515.
DOI: 10.3390/sym13081515
ISSN: 2073–8994
(ИФ=2,713 за 2020. годину, 33/73, област: Multidisciplinary Sciences) **5 поена**
- 2.12 **Izudin Redžepović**, Boris Furtula, Comparative study on structural sensitivity of eigenvalue—based molecular descriptors, *J. Math. Chem.* **59** (2021) 476–487.
DOI: 10.1007/s10910-020-01202-6
ISSN: 0259–9791
(ИФ=2,357 за 2020. годину, 44/108, област: Mathematics, Interdisciplinary Applications) **5 поена**

Радови публиковани у међународним часописима (M23)

- 2.13 **Izudin Redžepović**, Chemical applicability of Sombor indices, *J. Serb. Chem. Soc.* **86** (2021) 445–457.
DOI: 10.2298/JSC201215006R
ISSN: 0352–5139
(ИФ=1,240 за 2020. годину, 141/178, област: Chemistry, Multidisciplinary) **3 поена**
- 2.14 **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: 1318–0207
(ИФ=1,735 за 2020. годину, 127/178, област: Chemistry, Multidisciplinary) **3 поена**
- 2.15 **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=2,097 за 2020. годину, 117/178, област: Chemistry, Multidisciplinary) **3 поена**
- 2.16 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=0,812 за 2019. годину, 151/177, област: Chemistry, Multidisciplinary) **3 поена**
- 2.17 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) **2,50 поена**

Радови публиковани у националним часописима међународног значаја (M24)

- 2.18 **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: 1820–6530

2 поена

Радови публиковани у врхунским часописима националног значаја (M51)

- 2.19 **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

2 поена

Радови публиковани у истакнутим часописима националног значаја (M52)

- 2.20 Ivan Gutman, Veerabhadrappa R. Kulli, **Izudin Redžepović**, Sombor index of Kragujevac trees, *Sci. Publ. State Univ. Novi Pazar, Ser. A: Appl. Math. Inform. Mechan.* **13** (2021) 61–70.

ISSN: 2217–5539

1,5 поена

Радови публиковани у часописима националног значаја (M53)

- 2.21 Ivan Gutman, **Izudin Redžepović**, Juan Rada, Relating energy and Sombor energy, *Contrib. Math.* **4** (2021) 41–44.

DOI: 10.47443/cm.2021.0054

ISSN: 2709–3646

1 поен

- 2.22 Ivan Gutman, V. R. Kulli, **Izudin Redžepović**, Nirmala index of Kragujevac trees, *Int. J. Math. Trends Technol.* **67** (2021) 44–49.

DOI: 10.14445/22315373/IJMTT-V67I6P506

ISSN: 2231–5373

1 поен

- 2.23 **Изудин Реџеповић**, Борис Фуртула, Тополошки молекулски дескриптори, *Хемијски њреїлед*, **61** (2020) 131–136.

ISSN: 0440–6826

1 поен

- 2.24 Светлана Марковић, Слађана Ђорђевић, **Изудин Реџеповић**, Жико Милановић, Симулирање хемијских спектра помоћу софтвера за молекулско моделирање, *Хемијски њреїлед*, **60** (2019) 90–95.

ISSN: 0440–6826

0,83 поена

Научна саопштења на међународним конференцијама штампана у целини (M33)

1. **Izudin Redžepović**, Boris Furtula, Assessing structural similarity of compounds with physiological response: comparative study on similarity metrics, *1st International Conference on Chemo and Bioinformatics*, Kragujevac, Serbia, October 26-27, 2021, 446–449, Book of Proceedings, ISBN: 978-86-82172-01-7.

1 поен

Научна саопштења на међународним конференцијама штампана у изводу (M34)

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)*, Belgrade, Serbia, September 4–6, 2019, T.4.6, ICCB 2019 Proceedings, ISBN: 978-86-81037-75-1.

0,5 поена

2. **Izudin Redžepović**, Svetlana Marković, Jelena Tošović, Theoretical investigation of antioxidative activity of caffeic acid, *4th South-East European Conference on Computational Mechanics (SEECM)*, Kragujevac, Serbia, July 03–04, 2017, T.2.1., 24. Book of abstracts, ISBN: 978-86-921243-0-3.

0,5 поена

Научна саопштења на националним конференцијама штампана у изводу (M64)

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, Serbia, 27th October, 2018, TH06 PE 5. Book of abstracts, ISBN 978-86-7132-072-6.

0,17 поена

В. Приказ докторске дисертације и објављених радова

1. Приказ докторске дисертације

Предмет докторске дисертације **Изудина Реџеповића** су молекулски дескриптори. Молекулски дескриптори су бројеви или низови бројева који се користе за квантификовање молекулске структуре. Поседна класа молекулских дескриптора су графовске инваријанте. Познате су и као тополошки молекулски дескриптори. Извођење ових дескриптора омогућено је представљањем молекула молекулским графом. Многе корисне математичке величине могу се израчунати из молекулског графа, нпр. сопствене вредности. Стога је постало могуће конструисати и молекулске дескрипторе који се заснивају на сопственим вредностима. Они се називају тополошки молекулски дескриптори засновани на сопственим вредностима. Данас их има много. Само неколико њих користи сопствене вредности добијене из класичне матрице суседства.

Међу њима се истичу енергија графа, Естрадин индекс и резолвентна енергија. У оквиру ове докторске дисертације извршено је упоредно испитивање ова три дескриптора.

2. Приказ објављених радова

Рад 2.1 Генерализовани Жанг–Жангов (GZZ) полином је недавно уведен са циљем да се повећа осетљивост добро познатог Жанг–Жанговог полинома на π -електронску цикличну коњугацију десеточланих прстенова. У овом раду су изведене рекурзивне формуле за израчунавање GZZ бензеноидних система. Такође, дат је алгоритам за израчунавање GZZ бензеноидних ланаца. На крају, извршено је испитивање хемијске применљивости GZZ.

Рад 2.2 Способност три семиемпиријске методе (PM3, PM5 и PM7) у репродуковању енталпије формирања ($\Delta_f H^\circ$) полицикличних ароматичних фенола (PAP) је тестирана поређењем експерименталних и израчунатих вредности за 33 једињења. Поред тога, резултати семиемпиријских метода су упоређени са онима добијеним из одговарајућих изодезмичких реакција, који су добијени коришћењем B3LYP–D3 и M06–2X функционала у комбинацији са 6-311+G(d,p) основним сетом. Са просечном апсолутном грешком мањом од 10 kJ/mol, свих пет метода су дале међусобно упоредиве резултате. Узимајући у обзир високу рачунску ефикасност семиемпиријских метода, утицај структурних карактеристика на $\Delta_f H^\circ$ фенола испитивана је коришћењем PM5 и PM7 метода. Утврђено је да је највећи утицај на $\Delta_f H^\circ$ има величина молекула, док ефекти других структурних детаља, тј. положај ОН групе, број залива и гранање, су слабији. Утицај положаја ОН групе опада са њеним удаљавањем од молекулских крајева, и на крају постаје безначајан. Како су гранање и број залива међусобно зависни и одговарајући молекули су често непланарни, тешко је испитати појединачне доприносе ових структурних карактеристика. Генерално, $\Delta_f H^\circ$ се смањује са повећањем броја залива и молекулског гранања.

Рад 2.3 Овај рад је усмерен ка процени предиктивног потенцијала тополошких молекулских дескриптора заснованих на сопственим вредностима. Енергија графа, Естрадин индекс, резолвентна енергија и Лапласова енергија су тестирани као параметри за предвиђање тачке кључања, топлоте формирања и коефицијента расподеле октанол/вода алкана. Показало се да молекулски дескриптор базиран на сопственим вредностима се не може појединачно користити за успешно предвиђање ових физичко–хемијских својстава, већ први загревачки индекс, број нула у спектру и број метил група, такође, морају бити укључени у моделе. Изведени статистички параметри показују да су модели конструисани коришћењем Естрадиног индекса и резолвентне енергије значајно бољи него они са енергијом графа и Лапласовом енергијом. Такав тренд је још уочљивији у случају коефицијента расподеле октанол/вода алкана.

Рад 2.4 Међу више од две стотине тополошких индекса заснованих на сопственим вредностима само пар њих је дефинисано коришћењем сопствених вредности из матрице суседства графа. Резолвентна енергија је вероватно најновији такав индекс. У овом раду је испитивана дегенеративност енергије, Естрадиног индекса и резолвентне енергије. Дискутована је привидна дегенеративност резолвентне енергије у случају хемијских стабала. Такође, представљени су подаци везани за претраживање r -еквиенергетских хемијских стабала.

Рад 2.5 k -Центрични Штајнеров индекс заснован на степену и растојању чворова (SDD_k) је скоро уведен и представља проширење индекса заснованог на степену и растојању чворова (DD). У оквиру овог рада испитан је предикциони потенцијал SDD_k . Такође, везе између овог и неких познатих индекса заснованих на растојању код стабала су испитане како би се објаснио његов предикциони потенцијал. На крају, дате су доње и горње границе за овај индекс за опште графове.

Рад 2.6 Укупна π -електронска енергија (E_π), енергија највише попуњене молекулске орбитале (E_{HOMO}) и енергија најниже попуњене орбитале (E_{LOMO}), у оквиру Хикелове теорије, могу се изразити преко сопствених вредности матрице суседства одговарајућег молекулског графа. У овом раду су испитане везе између E_π , E_{HOMO} и E_{LOMO} . Успостављене су апроксимативне формуле које повезују E_π , E_{HOMO} и E_{LOMO} код бензеноидних угљоводоника.

Рад 2.7 У овом раду је испитивана зависност енталпије образовања ($\Delta_f H^\circ$) катакондензованих бензеноидних угљоводоника (CBHs) од структурних детаља. Како би се испитао утицај величине молекула (изражен преко броја хексагона h), броја залива (B), броја увала (C), броја фјордова (F) и молекулског гранања (изражен преко броја хексагона типа A_3 , h_{A_3}), развијен је једноставан математички модел. Наиме, $\Delta_f H^\circ$ ових молекула је апроксимирана као линеарна комбинација првих неколико спектралних момената, до M_{12} . У ову сврху $\Delta_f H^\circ$ -вредности за 1221 катакондензована бензеноидна угљоводоника, добијене помоћу PM7 методе, су употребљене за тренирање модела. Срећом, формуле које показују зависност спектралних момената од молекулске структуре су већ развијене. Слагање између експерименталних и израчунатих вредности је добро, са просечном релативном грешком од 4.5%. Пронађено је да је $\Delta_f H^\circ$ највећим делом одређена са h , где се $\Delta_f H^\circ$ повећава са повећањем h . Фине промене $\Delta_f H^\circ$ су објашњене помоћу других структурних детаља. $\Delta_f H^\circ$ се смањује са повећањем B , C и F , док се повећава са повећањем h_{A_3} .

Рад 2.8 За све могуће катакондензоване Кекулеове молекуле који имају четири, пет и шест хексагона, молекулске вибрационе енергије су израчунате у оквиру хармонијске апроксимације на нивоима теорије HF, B3LYP и M06-2X у комбинацији са 6-311G(d,p) основним скупом. Утврђено је да су добијене енергије вибрација линеарна функција броја Кекулеових структура K , за скуп изомерних молекула. Коришћењем

недавно уведеног генерализованог Жанг–Жанговог полинома, показано је да се молекулске вибрационе енергије могу повезати са параметрима заснованим на Кларовим структурама. Добијене приближне формуле могу прецизно да репродукују вибрационе енергије са просечном апсолутном грешком мањом од 1 kJ/mol. Поред тога, ове формуле могу пружити додатне детаље о структурној зависности енергија молекулских вибрација.

Рад 2.9 Сомборски индекс је недавно уведен тополошки индекс заснован на степеном чвора, са којим је на природан начин повезана матрица–названа сомборска матрица. Енергија графа $E(G)$ је збир апсолутних вредности сопствених вредности матрице суседства графа G . Аналогно томе, сомборска енергија $E_{SO}(G)$ је збир апсолутних вредности сопствених вредности сомборске матрице. У овом раду, представљамо резултате прорачуна о односима између $E_{SO}(G)$ и $E(G)$ за разне класе (молекулских) графова и уочавамо одговарајуће правилности. Утврђено је да је корелација између $E_{SO}(G)$ и $E(G)$ знатно комплекснија, него што је то раније представљено.

Рад 2.10 У овом раду се разматра енергија графа који садржи петље. Ако граф G реда n садржи σ петљи, тада је његова енергија дефинисана као $E(G) = \sum |\lambda_i - \frac{\sigma}{n}|$ где су $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ сопствене вредности матрице суседства. Одређене су неке основне особине $E(G)$ и указано на неколико отворених питања.

Рад 2.11 У оквиру ове студије, испитали смо три молекулска дескриптора заснована на сопственим вредностима. Ови тополошки молекулски дескриптори, између осталих, прикупљају информације о симетрији молекулског графа. Штавише, они се обично користе за предвиђање физичко–хемијске особине и/или биолошке активности молекула. Показало се да ови индекси добро описују молекулске карактеристике које зависе од финих структурних детаља. Дакле, откривање утицаја структурних детаља на вредности тополошких индекса заснованих на сопственим вредностима требало би да наслути како и физичко–хемијска својства зависе од њих. Овде је испитан ефекат прстена у молекулу на вредности енергије графа, Естрадиног индекса и резолвентне енергије.

Рад 2.12 Структурна осетљивост је једно од најважнијих и најмање истражених својстава тополошких молекулских дескриптора. Овај рад даје резултате о структурној осетљивости енергије графа, Естрадиног индекса и резолвентне енергије на неколико серија катакондензованих и перикондензованих изомерних бензеноидних угљоводоника. Недавно, представљена је нова метода за процену структурне осетљивости тополошких молекулских дескриптора, која је овде примењена. Овај алгоритам се састоји од неколико различитих корака и заснива се на Танимото индексу и Моргановом кружном отиску прста. Утврђено је да енергија графа, Естрадин индекс и резолвентна енергија имају сличну структурну осетљивост на катакондензоване изомере. Енергија графа је показала најбоље перформансе на перикондензованим молекулима. Поред

тога, осетљивост ових дескриптора је тестирана на катакондензованим изомерима са различитим број залива, увала и фјордова. Откривено је да ови дескриптори постепено мењају своју вредност са повећањем броја ових структурних детаља. Естрадин индекс и резолвентна енергија се понашају слично. Ово се може приписати високој корелацији између њих. Енергија графа је показала супериорност над друга два индекса код перикондензованих изомера.

Рад 2.13 Недавно је уведена нова класа тополошких молекулских дескриптора, тзв. сомборски индекси. У оквиру ове студије испитани су њихови предиктивни и дискриминативни потенцијали. Сва три тополошка молекулска дескриптора су показала добар предиктивни потенцијал. Статистички подаци указују да редуковани сомборски индекс показује нешто бољи предиктивни потенцијал. Екстерна провера потврдила је овај налаз. Откривено је да ови дескриптори, који су засновани на степену чвора, имају скроман дискриминативни потенцијал, када се тестирају на великој групи изомера.

Рад 2.14 Три тополошка молекулска дескриптора заснована на сопственим вредностима су упоређена коришћењем неколико скупова података за алкане. Два дескриптора су добро познати и често коришћени у различитим QSPR/QSAR истраживањима, а трећи је нови дескриптор чији предиктивни потенцијал тек треба да се докаже. Релације међу њима су пронађене и дискутоване. Структурни параметри који управљају овим односима су идентификовани и одговарајуће формуле засноване на вишеструкој линеарној регресији су добијене. Показало се да сва три испитивана индекса кодирају скоро исте структурне информације о молекулу. Разликују се само по степену осетљивости на структурно гранање молекула и по броју независних молекулских орбитала.

Рад 2.15 Овај рад приказује резултате о томе како структурни детаљи управљају топлотом формирања ($\Delta_f H^\circ$) катакондензованих бензеноидних угљоводоника, који представљају широку подкласу полицикличних ароматичних угљоводоника. Испитан је утицај величине молекула (изражен кроз број шесточланих прстенова, N_R), број залива (N_B), број увала (N_C), број фјордова (N_F), и молекулско гранање (изражено кроз број прстенова типа $B3$, N_{B3}), као и положај последње четири структурне карактеристике у молекулу. За добијање вредности $\Delta_f H^\circ$ примењена је семиемпиријска PM7 метода, која је показала добру сагласност са постојећим експерименталним резултатима. Ови структурни детаљи утичу на $\Delta_f H^\circ$ ових једињења на различите начине. Највећи утицај на $\Delta_f H^\circ$ има N_R , а утврђено је да $\Delta_f H^\circ$ расте са повећањем N_R . $\Delta_f H^\circ$, такође, расте са повећањем N_{B3} . Међутим, када се гранање креће ка средини молекула, откривено је да $\Delta_f H^\circ$ опада. $\Delta_f H^\circ$ испитиваних једињења опада са повећањем N_B , N_C и N_F , такође, и када се залив, увала и фјорд крећу ка средини молекула.

Рад 2.16 Успостављена је нова, једноставна релација између укупне π -електронске енергије и НОМО–LUMO разлике, која је примењива на бензеноидне угљоводонике.

Рад 2.17 Испитана је зависност промене енталпије формирања засићених ацикличних кетона од молекулске структуре (броја угљеникових атома, позиције карбонилне групе и гранања молекула). У ову сврху конструисан је једноставан компјутерски модел, чија је параметризација заснована на спектралној теорији графова. Нађено је да највећи део промене енталпије формирања зависи од величине молекула, а фини детаљи су одређени гранањем молекула и позицијом карбонилне групе. Развијени модел се показао као веома користан за оваква испитивања. Са једне стране модел је једноставан и практичан, а са друге слагање израчунатих промена енталпија формирања са експерименталним је веома добро, са просечном релативном грешком од 0,7%.

Рад 2.18 Однос између Естрадаиног индекса и резолвентне енергије је недавно објашњен на примеру алкана. Та веза укључује први загребачки индекс, поред ова два молекулска дескриптора заснована на сопственим вредностима. У овом раду се испитује квалитет корелације у случају изомерних бензеноидних угљоводоника, где је први загребачки индекс константан. Изванредне линеарне корелације су идентификоване за све проучаване групе изомерних бензеноидних угљоводоника.

Рад 2.19 У овом раду су приказани резултати свеобухватних механистичких истраживања преноса атома водоника (*HAT*), формирања адукта радикала (*RAF*), појединачног електрон трансфера – преноса протона (*SET – PT*) и секвенцијалног губитка протона и пренос електрона (*SPLET*) механизма кафеинске киселине (*CA*). Циљеви рада постигнути су симулацијом реакције *CA* са хидроксилним радикалом у раствору бензена и воде. Установљено је да *SET – PT* није повољан антиоксидативни механизам *CA*. С друге стране, *HAT* и *RAF* су конкурентни, јер *HAT* механизам даје термодинамички стабилније производе, а *RAF* механизам захтева нижу активациону баријеру. У поларном окружењу *SPLET* је могућ антиоксидативни механизам *CA*, са изузетно великом брзином.

Рад 2.20 Овај рад се бави сомборским индексом (*SO*) крагујевачких стабала (*Kg*). Дата је нешто општија дефиниција *Kg*. *SO* је недавно уведени тополошки индекс. Успостављен је општи комбинаторни израз за *SO(Kg)*. Одређене су врсте које имају минималне и максималне *SO(Kg)*-вредности.

Рад 2.21 У овом раду је показано да за сваки бипартитни граф *G*, који не садржи циклове величине дељиве са 4, важи да су његова енергија графа $E(G)$ и сомборска енергија $E_{SO}(G)$ повезане као $\sqrt{2}\delta E(G) \leq E_{SO}(G) \leq \sqrt{2}\Delta E(G)$, где су δ и Δ минимални и максимални степен чвора графа *G*.

Рад 2.22 Рад се бави Нирмала индексом (N) крагујевачких стабала (Kg). Крагујевачко стабло је класа графова која се појавила у оквиру проучавања индекса повезаности атом–веза. Нирмала индекс је недавно уведен дескриптор заснован на степену чвора. Успостављен је општи комбинаторни израз за $N(Kg)$. Одређена су стабла са минималним и максималним $N(Kg)$ –вредностима.

Рад 2.23 Природа је разнолика и компликована. Екстракција информација из таквог окружења захтева параметре по којима се објекти могу разликовати. Да би се овај задатак извршио, објекат мора бити јасно дефинисан. Исти начин расуђивања се може применити на хемију. Идеја код које физичко–хемијске особине зависе од молекулске структуре, представља камен–темељац модерне хемије. Обично је тешко идентификовати и квантитативно утврдити ову зависност. Тополошки молекулски дескриптори су од огромне помоћи, јер они олакшавају прикупљање информација кодираних у дво-димензионалној молекулској структури.

Рад 2.24 Развој рачунарских метода и компјутерске технике омогућио је појаву програма за молекулско моделирање који веома успешно репродукују резултате неких уређаја који се користе у спектроскопској инструменталној хемијској анализи. То значи да постоји одлично слагање између експерименталних и израчунатих резултата у оним случајевима где су експериментални резултати доступни, те се може направити поређење. Да би поткрепили ове тврдње, симулирали смо хемијске спектре нафталена, а потом их поредили са експерименталним спектрима (литературни подаци).

Г. Цитираност

Према бази Scopus, 6 радова др **Изудина Реџеповића** је цитирано 34 пута, не рачунајући аутоцитате, док хетероцитатни Хиршов индекс износи 2.

Списак цитата:

Рад 2.3

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: 0920–654X

Број хетероцитата: 1

Цитиран је у:

1. Muhammad Yasir Hayat Malik, Muhammad Ahsan Binyamin, Sakander Hayat, Correlation ability of degree–based topological indices for physicochemical properties of polycyclic aromatic hydrocarbons with applications, *Polycycl. Aromat. Comp.* (2021) прихваћен за штампу.

DOI: 10.1080/10406638.2021.1977349

ISSN: 1040-6638

Рад 2.4

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.

https://match.pmf.kg.ac.rs/electronic_versions/Match84/n2/match84n2_385-397.pdf

ISSN: 0340-6253

Број хетероцитата: 1

Цитиран је у:

1. Hanyuan Deng, Zikai Tang, Renfang Wu, Molecular trees with extremal values of Sombor indices, *Int. J. Quantum Chem.* **121** (2021) e26622.

DOI: 10.1002/qua.26622

ISSN: 0020-7608

Рад 2.5

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: 0020-7608

Број хетероцитата: 3

Цитиран је у:

1. Ivan Gutman, On degree-and-distance-based topological indices, *Rev. Roum. Chim.* **66** (2021) 119-123.

DOI: 10.33224/rrch.2021.66.2.02

ISSN: 0035-3930

2. Yaping Mao, Boris Furtula, Steiner distance in chemical graph theory, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **86** (2021) 211–287.

https://match.pmf.kg.ac.rs/electronic_versions/Match86/n2/match86n2_211-287.pdf

ISSN: 0340-6253

3. Zhonghua Li, Baoyindureng Wu, The Steiner Wiener index of trees with given bipartition, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **86** (2021) 363–373.

<https://match.pmf.kg.ac.rs/content86n2.htm>

ISSN: 0340-6253

Рад 2.6

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.

https://match.pmf.kg.ac.rs/electronic_versions/Match84/n1/match84n1_229-237.pdf

ISSN: 0340–6253

Број хетероцитата: 2

Цитиран је у:

1. A. Jahanbani, S. M. Sheikholeslami, R. Khoeilar, On the energy of benzenoid hydrocarbons, *Polycycl. Aromat. Comp.* (2021) прихваћен за штампу.
DOI: 10.1080/10406638.2021.1933103
ISSN: 1040–6638
2. Yuta Tsuji, Kazunari Yoshizawa, From infection clusters to metal clusters: significance of the lowest occupied molecular orbital (LOMO), *ACS Omega* **6** (2021) 1339–1351.
DOI: 10.1021/acsomega.0c04913
ISSN: 2470–1343

Рад 2.13

Izudin Redžepović, Chemical applicability of Sombor indices, *J. Serb. Chem. Soc.* **86** (2021) 445–457.

DOI: 10.2298/JSC201215006R

ISSN: 0352–5139

Број хетероцитата: 26

Цитиран је у:

1. Srinivasan Melaiyur Sankarraman, A computational approach on acetaminophen drug using degree-based topological indices and m -polynomials, *Biointerface Res. Appl. Chem.* **12** (2022) 7429–7266.
DOI: 10.33263/BRIAC126.72497266
ISSN: 2069-5837
2. Xiaoling Sun, Jianwei Du, On Sombor index of trees with fixed domination number, *Appl. Math. Comput.* **421** (2022) 126946.
DOI: 10.1016/j.amc.2022.126946
ISSN: 0096–3003
3. Yilun Shang, Sombor index and degree-related properties of simplicial networks, *Appl. Math. Comput.* **419** (2022) 126881.
DOI: 10.1016/j.amc.2021.126881
ISSN: 0096–3003
4. Shuchao Li, Zheng Wang, Minjie Zhang, On the extremal Sombor index of trees with a given diameter, *Appl. Math. Comput.* **416** (2022) 126731.
DOI: 10.1016/j.amc.2021.126731
ISSN: 0096–3003

5. Wenjie Ning, Yuheng Song, Kun Wang, More on Sombor index of graphs, *Mathematics* **10** (2022) 301.
DOI: 10.3390/math10030301
ISSN: 2227-7390
6. Zhao Wang, Yaping Mao, Yue Li, Boris Furtula, On relations between Sombor and other degree-based indices, *J. Appl. Math. Comput.* **68** (2022) 1-17.
DOI: 10.1007/s12190-021-01516-x
ISSN: 1598-5865
7. Hechao Liu, Lihua You, Yufei Huang, Xiaona Fang, Spectral properties of p -Sombor matrices and beyond, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **87** (2022) 59-87.
DOI: 10.46793/match.87-1.059L
ISSN: 0340-6253
8. Kinkar Chandra Das, Ivan Gutman, On Sombor index of trees, *Appl. Math. Comput.* **412** (2022) 126575.
DOI: 10.1016/j.amc.2021.126575
ISSN: 0096-3003
9. Weilin Zhang, Lihua You, Hechao Liu, Yufei Huang, The expected values and variances for Sombor indices in a general random chain, *Appl. Math. Comput.* **411** (2021) 126521.
DOI: 10.1016/j.amc.2021.126521
ISSN: 0096-3003
10. Roberto Cruz, Juan Rada, José M. Sigarreta, Sombor index of trees with at most three branch vertices, *Appl. Math. Comput.* **409** (2021) 126414.
DOI: 10.1016/j.amc.2021.126414
ISSN: 0096-3003
11. Kinkar Chandra Das, Ali Ghalavand, Ali Reza Ashrafi, On a conjecture about the Sombor index of graphs, *Symmetry* **13** (2021) 1830.
DOI: 10.3390/sym13101830
ISSN: 2073-8994
12. S. Ruth Julie Kavitha, Jessie Abraham, Micheal Arockiaraj, Joseph Jency, Krishnan Balasubramanian, Topological characterization and graph entropies of tessellations of Kekulé structures: existence of isentropic structures and applications to thermochemistry, nuclear magnetic resonance, and electron spin resonance, *J. Phys. Chem. A* **125** (2021) 8140-8158.
DOI: 10.1021/acs.jpca.1c06264
ISSN: 1089-5639
13. Xiaona Fang, Lihua You, Hechao Liu, The expected values of Sombor indices in random hexagonal chains, phenylene chains and Sombor indices of some chemical graphs, *Int. J. Quantum Chem.* **121** (2021) e26740.

DOI: 10.1002/qua.26740

ISSN: 0020-7608

14. Hechao Liu, Hanlin Chen, Qiqi Xiao, Xiaona Fang, Zikai Tang, More on Sombor indices of chemical graphs and their applications to the boiling point of benzenoid hydrocarbons, *Int. J. Quantum Chem.* **121** (2021) e26689.
DOI: 10.1002/qua.26689
ISSN: 0020-7608
15. Juan Rada, José M. Rodríguez, José M. Sigarreta, General properties on Sombor indices, *Discrete Appl. Math.* **299** (2021) 87-97.
DOI: 10.1016/j.dam.2021.04.014
ISSN: 0166-218X
16. R. Aguilar-Sánchez, J. A. Méndez-Bermúdez, José M. Rodríguez, José M. Sigarreta, Normalized Sombor indices as complexity measures of random networks, *Entropy* **23** (2021) 976.
DOI: 10.3390/e23080976
ISSN: 1099-4300
17. Kinkar Chandra Das, Yilun Shang, Some extremal graphs with respect to Sombor index, *Mathematics* **9** (2021) 1202.
DOI: 10.3390/math9111202
ISSN: 2227-7390
18. Roberto Cruz, Juan Rada, Extremal values of the Sombor index in unicyclic and bicyclic graphs, *J. Math. Chem.* **59** (2021) 1098-1116.
DOI: 10.1007/s10910-021-01232-8
ISSN: 0259-9791
19. Seda Oğuz Ünal, An application of Sombor index over a special class of semigroup graph, *J. Math.* **2021** (2021) 3273117.
DOI: 10.1155/2021/3273117
ISSN: 2314-4629
20. Shiikhar Dorjsembe, Batmend Horoldagva, Reduced Sombor index of bicyclic graphs, *Asian-European J. Math.* (2021) прихваћен за штампу 2250128.
DOI: 10.1142/S1793557122501285
ISSN: 1793-7183
21. K. J. Gowtham, Narahari Narasimha Swamy, On Sombor energy of graphs, *Nanosystems: Phys. Chem. Math.* **12** (2021) 411-417.
DOI: 10.17586/2220-8054-2021-12-4-411-417
ISSN: 2220-8054

22. Ting Zhou, Zhen Lin, Lianying Miao, The Sombor index of trees and unicyclic graphs with given maximum degree, *Discrete Math. Lett.* **7** (2021) 24–29.
DOI: 10.47443/dml.2021.0035
ISSN: 2664–2557
23. Yufei Huang, Hechao Liu, Bounds of modified Sombor index, spectral radius and energy, *AIMS Math.* **6** (2021) 11263–11274.
DOI: 10.3934/math.2021653
ISSN: 2473–6988
24. Hechao Liu, Lihua You, Zikai Tang, Jia–Bao Liu, On the reduced Sombor index and its applications, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **86** (2021) 729–753.
<https://match.pmf.kg.ac.rs/content86n3.htm>
ISSN: 0340–6253
25. Tomislav Došlić, Tamas Réti, Akbar Ali, On the structure of graphs with integer Sombor indices, *Discrete Math. Lett.* **7** (2021) 1–4.
DOI: 10.47443/dml.2021.0012
ISSN: 2664–2557
26. Saeid Alikhani, Nima Ghanbari, Sombor index of polymers, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **86** (2021) 715–728.
<https://match.pmf.kg.ac.rs/content86n3.htm>
ISSN: 0340–6253

Рад 2.14

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: 1318–0207

Број хетероцитата: 1

Цитиран је у:

1. Emir Zogić, Bojana Borovićanin, Edin Glogić, Igor Milovanović, Emina Milovanović, New bounds for some spectrum–based topological indices of graphs, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **86** (2021) 685–701.
<https://match.pmf.kg.ac.rs/content86n3.htm>
ISSN: 0340–6253

Д. Мишљење комисије

Комисија је на основу детаљне анализе радова и постигнутих резултата **др Изудина Реџеповића**, истраживача-сарадника на Институту за хемију Природно-математичког факултета у Крагујевцу, закључила да се ради о значајном научном доприносу.

Резултати досадашњег научно-истраживачког рада кандидата су објављени у виду 17 радова у часописима са SCI листе (1 рад категорије M21a, 6 радова категорије M21, 5 радова категорије M22 и 5 радова категорије M23), по 1 рад у часописима категорије M24, M51 и M52, и 4 рада у часописима категорије M53. Поред тога, кандидат има и 4 рада која су представљена на међународним и националним конференцијама, а који су штампани у целости или у изводу. Укупна вредност M фактора износи **115,7**, док је нормирана вредност **108,1**. Осим научних резултата који не подлежу нормирању јер је $n \leq 3$, радови су нормирани користећи израз: $K/(1 + 0,2(n - 3))$, за $n \geq 3$.

Имајући у виду целокупне резултате **др Изудина Реџеповића**, његову компетентност за избор у звање **научни сарадник** карактеришу следеће вредности индикатора:

Ознака резултата	Укупан број радова	Вредност индикатора	Укупна вредност (нормирано)
M21a	1	10	10 (7,14)
M21	6	8	48 (46,67)
M22	5	5	25 (22,29)
M23	5	3	15 (14,5)
M24	1	2	2 (2)
M33	1	1	1 (1)
M34	2	0,5	1 (1)
M51	1	2	2 (2)
M52	1	1,5	1,5 (1,5)
M53	4	1	4 (3,83)
M64	1	0,2	0,2 (0,17)
M70	1	6	6
Укупна вредност коефицијента 115,7 (108,1)			

КРИТЕРИЈУМИ ЗА ИЗБОР У НАУЧНО ЗВАЊЕ НАУЧНИ САРАДНИК (за природно-математичке и медицинске науке)

Потребан услов	Неопходно	Остварено (нормирано)
Укупно	16	115,7 (108,1)
M10+M20+M31+M32+M33+M41+M42	10	101 (93,6)
M11+M12+M21+M22+M23	6	98 (90,6)

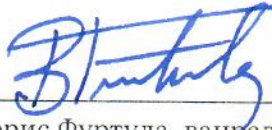
ЗАКЉУЧАК

На основу детаљне анализе постигнутих резултата, може се закључити да је **др Изудин Реџеповић** својим досадашњим научно–истраживачким радом дао значајан и оригиналан допринос научној области Хемија. Одбранио је докторску дисертацију у овој области и објавио 17 радова у часописима са SCI листе.

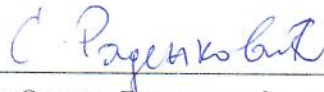
На основу претходно изнетих чињеница, које су у складу са Законом о науци и истраживањима, може се закључити да је **др Изудин Реџеповић** испунио све услове за избор у звање **научни сарадник** за научну област Хемија. Сходно томе, предлажемо Наставно–научном већу Природно–математичког факултета у Крагујевцу да прихвати предлог за избор **др Изудина Реџеповића** у звање **научни сарадник** за научну област Хемија и упути га надлежној комисији Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије у даљу процедуру.

У Крагујевцу и Нишу,
19. фебруар 2022. године.

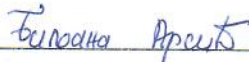
КОМИСИЈА



Др Борис Фуртула, ванредни професор
–председник комисије–
Природно–математички факултет
Универзитет у Крагујевцу
Ужа научна област: Физичка хемија



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



Др Биљана Арсић, виши научни сарадник
Природно–математички факултет
Универзитет у Нишу
Научна област: Хемија