

Универзитет у Београду
ХЕМИЈСКИ ФАКУЛТЕТ

ПРИМЉЕНО: 10. 7. 2020.			
Орг. јед.	Број	Прилог	Вредности
	471/3		

Универзитет у Београду – Хемијски Факултет

Наставно-Научном Већу Хемијског Факултета

На седници Наставно-научног већа Хемијског факултета - Универзитета у Београду, одржаној 11. 06. 2020. године и на основу одлуке број 471/2 11.06.2020, именовани смо за чланове Комисије за писање извештаја за избор кандидата др Драгана Нинковића, дипл. хем., у звање **виши научни сарадник**. На основу достављене и прикупљене документације о научноистраживачком и педагошком раду кандидата, у складу са критеријумима Закона о науци и истраживањима ("Сл. гласник РС", бр. 49/2019) и „Правилника о поступку и начину вредновања и квантитативном исказивању научноистраживачких резултата истраживача” (Службени гласник РС, број 24/2016, 21/2017 и 38/2017) подносимо Наставно-научном већу Хемијског факултета Универзитета у Београду следећи:

ИЗВЕШТАЈ

1. БИОГРАФСКИ ПОДАЦИ

Драган Б. Нинковић рођен је 19. 05. 1982. године у Шапцу, где је завршио основну и средњу школу. Хемијски факултет Универзитета у Београду уписао је школске 2001/02. године. Дипломирао је у новембру 2008. године при Катедри за општу и неорганску хемију Хемијског факултета. Уписао је мастер академске студије школске 2008/09. године. Мастер рад под називом „Стекинг интеракције слободних и координованих молекула пиридина у кристалним структурама“ одбранио је на Хемијском факултету септембра 2010. године, из области теоријске хемије.

Од јануара 2011. године запослен је на Иновационом центру Хемијског факултета у Београду. Докторску дисертацију под називом „Паралелне нековалентне интеракције ароматичних и алифатичних молекула” одбранио је 14. 08. 2014. године на Хемијском факултету Универзитета у Београду, под руководством проф. Снежане Зарић. Од 1. јула 2015 до 1. маја 2018 боравио је на Тексас А&М универзитету у Катару, Доха, Катар, на постдокторском усавршавању.

1.1 Кретање у служби

- Јануар 2011- Истраживач-сарадник Иновационог центра Хемијског факултета
- Јул 2015- Мај 2018 - Постдокторска позиција на "Texas A&M university at Qatar" у Катару.

1.2 Педагошки рад

Током свог рада др Драган Нинковић је био ангажован за извођење вежби као сарадник на курсу Рачунарска хемија, за студенте ИВ године студијског програма хемичар, у току школске 2012/2013. и 2013/2014. године.

Кандидат је учествовао у руковођењу израде једног завршног рада и био члан комисије за преглед и одбрану више завршних и мастер радова.

1.3 Међународна сарадња

- Као стипендиста ДААД фондације боравио је на Макс Планк институту за хемијску физику чврстог стања у Дрездену, Немачка, у периоду од 1. јула до 31. јула 2009. године.
- Као стипендиста ДААД фондације боравио је на Макс Планк институту за хемијску физику чврстог стања у Дрездену, Немачка, у периоду од 1. септембра до 30. новембра 2010. године.
- Био је ангажован на пројекту " Supramolecular training for students and young researchers in the Balkan area " (од 2012. до 2014. године, финансиран од Швајцарске националне научне фондације). Као учесник овог међународног пројекта боравио је на Департману за хемију Универзитета у Фрибургу, Швајцарска, у периоду од 1. фебруара до 31. марта 2013. године.
- Био је на постдокторком усавршавању на Тексас А&М универзитету у Катару, Доха, Катар. Радио на пројекту NPRP 7-297-1-051 Катарског националног истраживачког фонда под називом "Computational Investigation of Carbon-Hydrogen Bond Activation" од 1. јула 2015. до 31. априла 2018. године.

2. БИБЛИОГРАФИЈА РАДОВА

Др. Драган Нинковић је од избора у звање научни сарадник објавио 10 научних радова у међународним часописима (3 рада међународним часописима изузетних вредности из категорије M21a, 6 радова у врхунским међународним часописима из категорије M21, и 1 рад у истакнутом међународном часопису из категорије M22, према критеријумима ресорног министарства Републике Србије). Осим тога, резултате својих истраживања саопштио је на међународним и домаћим научним скуповима (17 саопштења).

2.1 Научни радови и саопштења објављена после избора у научно звање научни сарадник, тј. од доношења одлуке Наставно-Научног већа Хемијског Факултета Универзитета у Београду о предлогу за стицање научног звања виши научни сарадник (11. 12. 2014. године) су означени*.

2.1.1 Радови у међународним часописима изузетних вредности, M21a:3

Укупно бодова - нормирано према броју аутора = 23,33

Укупан ИФ = 26,150

M21a-1. Dragan B. Ninković, Salvador Moncho, Predrag V. Petrović, Snežana D. Zarić, Michael B. Hall, Edward N. Brothers, Methane Activations by Titanium Neopentylidene Complexes: Electronic Resilience and Steric Control, *Inorganic Chemistry*, 56, 15, 9264 – 9272 (2017)

<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.inorgchem.7b01340>

Импак фактор часописа (2016): 4,857, „Chemistry, Inorganic & Nuclear“ 4/46,

Цитираност „Scopus“ (без аутоцитата): 3

М нормирано= 8,33

M21a-2. Upendar Reddy Gandra, Alessandro Sinopoli, Salvador Moncho, Manjula NandaKumar, Dragan B. Ninković, Snežana D. Zarić, Muhammad Sohail, Saeed Al-Meer, Edward N. Brothers, Nayef A. Mazloum, Mohammed Al-Hashimi, Hassan S. Bazzi, Green Light-Responsive CO-Releasing Polymeric Materials Derived from Ring-Opening Metathesis Polymerization, *ACS Applied Materials & Interfaces*, 11, 37, 34376 – 34384 (2020)-

<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acsami.9b12628>

Импак фактор часописа (2018): 8.456, „Materials Science, Multidisciplinary“ 27/273,

Цитираност „Scopus“ (без аутоцитата): 4

М нормирано= 5

M21a-3. Dragan B. Ninković, Jelena P. Blagojević, Edward N. Brothers, Michael B. Hall, Snežana D. Zarić, What Is Special about Aromatic-Aromatic Interactions? Significant Attraction at Large Horizontal Displacement, ACS Central Science, 6, 3, 420–425 (2020)

<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acscentsci.0c00005>

Импак фактор часописа (2018): 12,837, „Chemistry, Multidisciplinary“ 15/172

Цитираност „Scopus“ (без аутоцитата): 1

М нормирано= 10

2.1.2 Радови у врхунским међународним часописима M21: 6

Укупно бодова - нормирано према броју аутора = 40,67

Укупан ИФ = 24,741

***M21-1.** Dušan P. Malenov, Dragan B. Ninković, Snežana D. Zarić, Stacking of Metal Chelates with Benzene: Can Dispersion-Corrected DFT Be Used to Calculate Organic-Inorganic Stacking?, ChemPhysChem, 16, 761 – 768 (2015)

<https://chemistry-europe.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/cphc.201402589>

Импак фактор часописа (2014): 3,419, „Physics, Atomic, Molecular & Chemical“ 7/34

Цитираност „Scopus“ (без аутоцитата): 11

М нормирано= 8

M21-2. Dragan B. Ninković, Dubravka Z. Vojislavljević-Vasilev, Vesna B. Medaković, Michael B. Hall, Edward N. Brothers, S. D. Zarić, Aliphatic-aromatic stacking interactions in cyclohexane-benzene are stronger than aromatic-aromatic interaction in the benzene dimer, Physical Chemistry Chemical Physics, 18, 37, 25791 - 25795 (2016)

<https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2016/CP/C6CP03734H#!divAbstract>

Импак фактор часописа (2015): 4,449, „Physics, Atomic, Molecular & Chemical“ 6/35

Цитираност „Scopus“ (без аутоцитата): 19

М нормирано= 6,67

M21-3. Dragan B. Ninković, Dušan P. Malenov, Predrag V. Petrović, Edward N. Brothers, Shuqiang Niu, Michael B. Hall, Milivoj R. Belić, Snežana D. Zarić, Unexpected importance of aromatic-aliphatic and aliphatic side chain-backbone interactions in the stability of amyloids, Chemistry-A European Journal, 23, 46, 11046 - 11053 (2017)

<https://chemistry-europe.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/chem.201701351>

Импак фактор часописа (2015): 5,771, „Chemistry, Multidisciplinary“ 24/163

Цитираност „Scopus“ (без аутоцитата): 3

М нормирано= 5

M21-4. Nucharee Chongboriboon, Kodchakorn Samakun, Thitirat Inprasit, Filip Kielar, Winya Dungkaew, Lawrence W. -Y. Wong, Herman H. -Y. Sung, Dragan B. Ninkovic, Snezana D. Zarić, Kittipong Chainok, Two-dimensional halogen-bonded organic frameworks based on the tetrabromobenzene-1,4-dicarboxylic acid building molecule, CrystEngComm, 22, 1, 24 - 34 (2020)

<https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2020/CE/C9CE01140D#!divAbstract>

Импак фактор часописа (2018): 3,382, „Crystallography“ 6/26

Цитираност „Scopus“ (без аутоцитата): 0

М нормирано= 5

M21-5. Jelena M. Živković, Ivana M. Stanković, Dragan B Ninković Snezana D. Zarić, Phenol and Toluene Stacking Interactions, including Interactions at Large Horizontal Displacements. Study of Crystal Structures and Calculation of Potential Energy Surfaces, Crystal Growth and Design 20(2), 1025-1034 (2020)

<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.cgd.9b01353>

Импак фактор часописа (2018): 4,153, „Crystallography“ 3/26

Цитираност „Scopus“ (без аутоцитата): 0

М нормирано= 8

M21-6. Milan R. Milovanović, Jelena M. Živković, Dragan B. Ninković, Ivana M. Stanković, Snežana D. Zarić, How flexible is the water molecule structure? Analysis of crystal structures and the potential energy surface, Physical chemistry chemical physics, 22(7), 4138-4143 (2020)

<https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2020/CP/C9CP07042G#!divAbstract>

Импак фактор часописа (2018): 3,567, „Physics, Atomic, Molecular & Chemical“ 9/36

Цитираност „Scopus“ (без аутоцитата): 0

М нормирано= 8

2.1.3 Радови у истакнутим међународним часописима M22: 1

Укупно бодова - нормирано према броју аутора = 4,17

Укупан ИФ = 1,795

M22-1. Dragan B. Ninković, Salvador Moncho, Predrag V. Petrović, Snežana D. Zarić, M. Hall, Edward N. Brothers, Carbon-hydrogen bond activation by a titanium neopentylidene complex, *Journal of Coordination Chemistry*, 69, 11-13, 1759 - 1768, (2016)

<https://www.tandfonline.com/doi/full/10.1080/00958972.2016.1172701>

Импак фактор часописа (2016): 1,795, „Chemistry, Inorganic & Nuclear“ 24/46

Цитираност „Scopus“ (без аутоцитата): 4

М нормирано= 4,17

2.1.4 Саопштења са међународних скупова штампана у изводу M34: 12

Укупно бодова M34 = 12x0,5 = 6

1. S. D. Zarić, D. Veljković, J. Andrić, D. Ninković, V. Medaković, D. Malenov, D. Vojislavljević-Vasilev, P. Petrović, Noncovalent interactions of aromatic molecules, 16th Tetrahedron Symposium, Berlin, Nemačka, 16. - 19. Jun, 2015
2. S. D. Zarić, D. Ž. Veljković, J. Andrić, D. Ninković, D. Vojislavljević, P. Petrović, Noncovalent interactions of water molecule, 7th International Conference on Modeling Interactions in Biomolecules MIB VII, Prague, Czech Republic, 14. - 18. Sep, 2015
3. S. D. Zarić, D. B. Ninković, E. Brothers, M.B. Hall, C-H activation by a titanium neopentylidyne complex., 251st American Chemical Society National Meeting &Exposition in San Diego Division of Inorganic Chemistry, 1388 INOR, USA, 13. - 17. Mar, 2016
4. Snežana D. Zarić, Dragan B. Ninković, Predrag V. Petrović, Dubravka Vojislavljević, Vesna Medaković, E. Brothers, M. B. Hall, What is special in aromatic/aromatic interactions?, 251st American Chemical Society National Meeting &Exposition in San Diego, 251st American Chemical Society National Meeting &Exposition in San Diego, 369 ORGN, USA, 13. - 17. Mar, 2016
5. Snežana D. Zarić, Dragan B. Ninković, Dubravka Vojislavljević, Vesna Medaković, E. Brothers, M. B. Hall, Снежана Зарић, Study of stacking interactions between benzene and cyclohexane, 251st American Chemical Society National Meeting &Exposition in San Diego, 522 ORGN, USA, 13. - 19. Mar, 2016

6. Dragan B. Ninković, Dušan P. Malenov, Predrag V. Petrović, Edward N. Brothers, Shuqiang Niu, Michael B. Hall, Milivoj Belić, Snežana D. Zarić, Theoretical study on the role of aromatic amino acids in stability of amyloids, Belgrade BioInformatics Conference 2016, 138 - 138, Serbia, 20. - 24. Jun, 2016
7. Dragan B. Ninković, Predrag V. Petrović, Dušan P. Malenov, Michael B. Hall, Edward N. Brothers, Snežana D. Zarić, Role of aromatic, aliphatic and backbone interactions in the stability of amyloids, 11th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemistry Book of abstracts, Ludwig-Maximilians-Universität (LMU), Munich, Germany, 27. Aug - 01. Sep, 2017
8. Dragan B. Ninković, Salvador Moncho, Predrag V. Petrović, Snežana D. Zarić, Michael B. Hall, Edward N. Brothers, Methane Activation by Titanium Neopentylidene Complexes: Modification of the ligands, 11th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists, Ludwig-Maximilians-Universität (LMU) 1189 (PO3-200), Munich, Germany, 27. Aug - 01.Sep 2017
9. Dragan B. Ninković, Dušan P. Malenov, Dušan Ž. Veljković, Jelena M. Andrić, Dubravka Vojislavljević-Vasilev, Ivana Veljković, Snežana D. Zarić, Noncovalent interactions of metal complexes, XXVII international conference on coordination and bioinorganic chemistry, 122 - 122, Smolenice, Slovačka, 2. - 7. Jun, 2019
10. Dragan B. Ninković, Dušan P. Malenov, Jelena P. Blagojević Filipović, Jelena M. Živković, Snežana D. Zarić, Pi-pi interactions in organic, coordination, and organometallic compounds, Book of abstract, 1st International Conferences on Noncovalent Interactions, PL12, Lisabon, 2. - 6. Sep, 2019
11. Milan R. Milovanović, Jelena M. Živković, Dragan B. Ninković, Ivana Stanković, Snežana D. Zarić, Structure of water molecule and water hydrogen bonding: joint Cambridge Structural Database and ab-initio calculations, Book of abstract, 1st International Conferences on Noncovalent Interactions, Book of abstract, 1st International Conferences on Noncovalent Interactions, pp. P101 - P101, Lisabon, 2. - 6. Sep, 2019
12. Dragan B. Ninković, Jelena M. Andrić, Snežana D. Zarić, Surprising Parallel Aromatic-Aromatic interactions at large horizontal displacement, 1st International Conferences on Noncovalent Interactions (ICNI-2019), pp. PL98 - PL98, Lisabon, 2. - 6. Sep, 2019

2.1.5 Саопштења са домаћих скупова штампана у изводу M64: 5

Ukupno M64 = 5x0,2=1

1. D. B. Ninković, D. Z. Vojislavljević–Vasilev, V. B. Medaković, M. B. Hall, S. D. Zarić, Алифатично–Ароматичне Стекинг Интеракције У Димеру Циклохексан–Бензен, XXIII Conference of Serbian Crystallographic Society, 34 - 35, Србија, 9. - 11. Jun, 2016
2. D. B. Ninković, I. Stanković, S. D. Zarić, Интеракције Ароматичних Група У Кристалима, XXIV КОНФЕРЕНЦИЈА СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА Изводи радова, XXIV Conference of Serbian Crystallographic Society Изводи радова, 44 - 45, Вршац, Србија, 22. - 24. Jun, 2017
3. D. B. Ninković, I. Stanković, M. Hall, E. Brothers, S. D. Zarić, Статистичка Анализа Агостичних Интеракција У Комплексима Прелазних Метала, XXIV Conference of Serbian Crystallographic Society, 52 - 53, Вршац, Србија, 22. - 24. Jun, 2017
4. M. R. Milovanović, J. M. Živković, D. B. Ninković, I. M. Stanković, S. D. Zarić, Да ли су углови молекула воде у кристалним структурама поуздани? Удружена анализа кембричке кристалографске базе података и ab-initio прорачуна, XXVI Conference of Serbian Crystallographic Society, 34 - 35, Сребрно језеро, 26. - 27. Jun, 2019
5. D. B. Ninković, D. Veljković, D. Malenov, M. R. Milovanović, J. M. Živković, I. M. Stanković, I. Veljković, V. Medaković, J. Blagojević Filipović, D. Vojislavljević Vasilev, S. D. Zarić, Noncovalent Interactions Of Metal Complexes And Aromatic Molecules, XXVI Conference of Serbian Crystallographic Society, 9 - 9, Srebrno jezero, 27. - 28. Jun, 2019

2.2 Научни радови и саопштења објављена пре избора у научно звање научни сарадник.

2.2.1 Радови у међународним часописима изузетних вредности, M21a: 1

Укупно бодова - нормирано према броју аутора = 10

Укупан ИФ = 4,689

M21a-4. D. B. Ninković, G. V. Janjić, S. D. Zarić, "Crystallographic and ab Initio Study of Pyridine Stacking Interactions. Local Nature of Hydrogen Bond Effect in Stacking Interactions", Crystal Growth & Design, 12(3), 1060–1063 (2012)

<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/cg201389y>

Импак фактор часописа (2012): 4,689, „Crystallography“ 2/23

Цитираност „Scopus“ (без аутоцитата): 52

М нормирано= 10

2.2.2 Радови у врхунским међународним часописима M21: 9

Укупно бодова - нормирано према броју аутора = 70,67

Укупан ИФ = 29,814

M21-7. D. B. Ninković, G. V. Janjić, D. Ž. Veljković, D. N. Sredojević, S. D. Zarić, “What are the preferred horizontal displacements in parallel aromatic-aromatic interactions?”, *ChemPhysChem*, 12(18), 3511–3514 (2011)

<https://chemistry-europe.onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1002/cphc.201100777>

Импак фактор часописа (2011): 3,412, „Physics, Atomic, Molecular & Chemical“ 6/33

Цитираност „Scopus“ (без аутоцитата): 46

М нормирано= 8

M21-8. G. V. Janjić, P. V. Petrović, D. B. Ninković, S. D. Zarić, “Geometries of stacking interactions between phenanthroline ligands in crystal structures of square-planar metal complexes”, *Journal of Molecular Modeling*, 17(8), 2083-2092 (2011)

<https://link.springer.com/article/10.1007/s00894-010-0905-3>

Импак фактор часописа (2011):1,797, „Computer Science, Interdisciplinary Applications“ 29/99

Цитираност „Scopus“ (без аутоцитата): 9

М нормирано= 8

M21-9. J. M. Andrić, G. V. Janjić, D. B. Ninković, S. D. Zarić, “The influence of water molecule coordination to a metal ion on water hydrogen bonds”, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 14(31), 10896-10898 (2012)

ISSN broj časopisa: 1463-9076

Импак фактор часописа (2012): 3,829, „Physics, Atomic, Molecular & Chemical“ 6/34

Цитираност „Scopus“ (без аутоцитата): 22

М нормирано= 8

M21-10. G. V. Janjić, D. B. Ninković, S. D. Zarić, “Influence of supramolecular structures in crystals on parallel stacking interactions between pyridine molecules”, *Acta Crystallographica Section B-Structural Science*, 69, 389-394 (2013)

<http://scripts.iucr.org/cgi-bin/paper?S2052519213013961>

Импак фактор часописа (2011): 2,286, „Crystallography“ 6/25

Цитираност „Scopus“ (без аутоцитата): 9

М нормирано= 8

M21-11. D. B. Ninković, J. M. Andrić, S. D. Zarić, “Parallel Interactions at Large Horizontal Displacement in Pyridine–Pyridine and Benzene–Pyridine Dimers”, *ChemPhysChem*, 14(1), 237-243 (2013)

<https://chemistry-europe.onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1002/cphc.201200607>

Импак фактор часописа (2013): 3,360, „Physics, Atomic, Molecular & Chemical“ 7/33

Цитираност „Scopus“ (без аутоцитата): 29

М нормирано= 8

M21-12. D. N. Sredojević, D. B. Ninković, G. V. Janjić, J. Zhou, M. B. Hall, S. D. Zarić, “Stacking Interactions of Ni(acac) Chelates with Benzene: Calculated Interaction Energies”, *ChemPhysChem*, 14(9), 1797-1800 (2013)

<https://chemistry-europe.onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1002/cphc.201201062>

Импак фактор часописа (2013): 3,360, „Physics, Atomic, Molecular & Chemical“ 7/33

Цитираност „Scopus“ (без аутоцитата): 9

М нормирано= 6,67

M21-13. D. Z. Vojislavljević, G. V. Janjić, D. B. Ninković, A. J. Kapor, S. D. Zarić, “The influence of water molecule coordination onto the water-aromatic interaction. Strong interactions of water coordinating to a metal ion”, *CrystEngComm*, 15(11), 2099-2105 (2013)

<https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2013/CE/c2ce25621e#!divAbstract>

Импак фактор часописа (2013): 3,858, „Crystallography“ 4/23

Цитираност „Scopus“ (без аутоцитата): 10

М нормирано= 8

M21-14. D. P. Malenov, D. B. Ninković, D. N. Sredojević, S. D. Zarić, “Stacking of Benzene with Metal Chelates: Calculated CCSD(T)/CBS Interaction Energies and Potential-Energy Curves”, *ChemPhysChem*, 15(12), 2458-2461 (2014)

<https://chemistry-europe.onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1002/cphc.201402114>

Импак фактор часописа (2013): 3,419, „Physics, Atomic, Molecular & Chemical“ 7/34

Цитираност „Scopus“ (без аутоцитата): 20

М нормирано= 8

M21-15. D. B. Ninković, J. M. Andrić, S. N. Malkov, S. D. Zarić, "What are the preferred horizontal displacements of aromatic-aromatic interactions in proteins? Comparison with the calculated benzene-benzene potential energy surface", *Physical Chemistry Chemical Physics*, 16(23), 11173-11177 (2014)

<https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2014/CP/C3CP54474E#!divAbstract>

Импак фактор часописа (2013): 4,493, „Physics, Atomic, Molecular & Chemical“ 6/34

Цитираност „Scopus“ (без аутоцитата): 32

М нормирано= 8

2.2.3 Радови у међународним часописима M23: 1

Укупно бодова - нормирано према броју аутора = 2,5

Укупан ИФ = 0,231

M23-1. Goran V. Janjić, Predrag Petrović, Dragan B. Ninković, Dušan Ž. Veljković, Agneš Kapor and Snežana D. Zarić, "Stacking Interactions Between Pyridine Fragments in Crystal Structures of Terpyridyl Complexes", *Studia Universitatis Babes-Bolyai Chemia*, 55(3), 165-176 (2010)

<http://cer.ihtm.bg.ac.rs/handle/123456789/691?locale-attribute=en>

Импак фактор часописа (2010): 0,231, „Chemistry, Multidisciplinary“ 137/147

Цитираност „Scopus“ (без аутоцитата): 2

М нормирано= 2,5

2.2.4 Саопштења са међународних скупова штампана у целости M33: 3

Укупно бодова M34 = 3x1 = 3

1. G. V. Janjić, P. Petrović, D. Ninković, S. D. Zarić, Stacking interactions between phenantroline ligands in crystal structures of square-planar metal complexes, 10th International Symposium on Metal Elements in Environment, Medicine and Biology, Timisoara, Romania, November, 2010.

2. D. Ninković, J. Dragelj, G. V. Janjić, S. D. Zarić, Study of stacking interactions between coordinated pyridines in square-planar metal complexes, 10th International Symposium on Metal Elements in Environment, Medicine and Biology, Timisoara, Romania, November, 2010.

3. D. P. Malenov, D. B. Ninković, G. V. Janjić, S. D. Zarić, Exploring the stacking of metal chelates with benzene by dispersion corrected DFT, Physical Chemistry 2014, 12th International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry, Belgrade, Septembar, 2014.

2.2.5 Саопштења са међународних скупова штампана у изводу М34:28

Укупно бодова М64 = 28x0,5 = 14

1. D. Ninković, P. Petrović, G. Janjić, Stacking interaction between 1, 10-phenanthroline ligands in crystal structures of metal complexes, Humbolt conference on noncovalent interactions, Vršac, Novembar, 2007.
2. D. Ninković, H. Borrmann, Considering an ordered model of hydrogen atoms in the framework of methane hydrate and related clathrates, Second Humbolt conference on noncovalent interactions, Vrsac, Serbia, October, 2009.
3. S. D. Zarić, G. Janjić, D. Sredojević, D. Veljković, J. Andrić, D. Ninković, P. Petrović, D. Vojislavljević, Noncovalent interactions of aromatic molecules, XXII Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography, Madrid, Spain, 2011.
4. D. B. Ninković, G. V. Janjić, P. V. Petrović, S. D. Zarić, Stacking interactions between phenanthroline ligands in squareplanar complexes, XXII Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography, Madrid, Spain, 2011.
5. G. V. Janjić, D. B. Ninković, D. Ž. Veljković, D. Z. Vojislavljević, J. M. Andrić, S. D. Zarić, The properties of metal complexes with phenantroline ligands. Analytical methods based on these properties, EUROanalysis2011, 16th European Conference on Analytical Chemistry, Beograd, 2011.
6. G. V. Janjić, D. B. Ninković, D. Ž. Veljković, S. D. Zarić, Water/aromatic parallel alignment interactions at large horizontal displacements, Summer School "Supramolecular Chemistry: Experimental and Theoretical Methods for Investigation" Sofia, Bulgaria, 2012.
7. J. Dragelj, D. B. Ninković, G. V. Janjić, S. D. Zarić, S. D. Zarić, Study of stacking interactions between coordinated pyridines in transition metal square-planar complexes, Summer School "Supramolecular Chemistry: Experimental and Theoretical Methods for Investigation" Sofia, Bulgaria, 2012.
8. D. N. Sredojević, D. B. Ninković, G. V. Janjić, S. D. Zarić, Stacking interactions of [Ni(acac)₂] with benzene. calculated interaction energies, Summer School "Supramolecular Chemistry: Experimental and Theoretical Methods for Investigation" Sofia, Bulgaria, 2012.
9. D. B. Ninković, G. V. Janjić, D. Ž. Veljković, D. N. Sredojević, S. D. Zarić, The interactions between benzene molecules with mutual parallel orientation. crystallographic and quantum-chemistry analysis, Summer School "Supramolecular Chemistry: Experimental and Theoretical Methods for Investigation" Sofia, Bulgaria, 2012.
10. J. M. Andrić, G. V. Janjić, D. B. Ninković, S. D. Zarić, Influence of metal cation on water hydrogen bonds. strong hydrogen bonds of water molecules in the first coordination shell, Summer School "Supramolecular Chemistry: Experimental and Theoretical Methods for Investigation" Sofia, Bulgaria, 2012.
11. J. M. Andrić, D. B. Ninković, G. V. Janjić, S. D. Zarić, Crystallographic and ab initio Study of Pyridine Stacking Interactions. Local Nature of Hydrogen Bond Effect in Stacking Interactions., Workshop on crystal engineering, University of Fribourg, Switzerland 23-25. Jul, 2012.

12. D. Z. Vojislavljević, G. V. Janjić, D. B. Ninković, A. Kapor, S. D. Zarić, The Influence of Water Molecule Coordination Onto the OH/ π Interaction. Strong OH/ π Interactions of Water Coordinated to a Metal Ion, Workshop on crystal engineering, University of Fribourg, Switzerland 23-25. Jul, 2012.
13. D. B. Ninković, P. V. Petrović, G. V. Janjić, S. D. Zarić, Crystallographic analysis of stacking interactions between phenanthroline ligands, Workshop on crystal engineering, University of Fribourg, Switzerland 23-25. Jul, 2012.
14. M. Misini, J. Andrić, D. Ninković, M. Milovanović, S. Zarić, The influence of water molecule coordination to a metal ion on water hydrogen bonds, 15th JCF-Frühjahrssymposium, Berlin, 6-9. Mart, 2013.
15. J. Andrić, D. Ninković, S. Zarić, Parallel Interactions at Large Horizontal Displacement in Pyridine-Pyridine and Benzene-Pyridine Dimers, 15th JCF-Frühjahrssymposium, Berlin, 6-9. Mart, 2013.
16. G. V. Janjić, P. V. Petrović, D. B. Ninković, S. D. Zarić, the structural and photochemical properties of metal complexes with phenantroline ligands, International Workshop, Sensing Applications of Supramolecular Chemistry, Plovdiv, Bulgaria, March, 2013.
17. M. R. Milovanović, J. M. Andrić, G. V. Janjić, D. B. Ninković, S. D. Zarić, The influence of wather molecule coordination on geometry and strength of hydrogen bonds, International Workshop, Sensing Applications of Supramolecular Chemistry, Plovdiv, Bulgaria, March, 2013.
18. D. B. Ninković, S. N. Malkov, J. M. Andrić, S. D. Zarić, Interaction of Phenylalanine Aromatic Rings in Proteins, International Summer School on Supramolecular Chemistry, Belgrde, 4-6. Avgust, 2013.
19. S. D. Zarić, G. V. Janjić, D. N. Sredojević, D. Veljković, J. Andrić, D. Ninković, D. Vojislavljević, P. Petrović, Noncovalent interactions of aromatic molecules, IUPAC, 44th World Chemistry Congres, Istanbul, Turkey, 11-16. Avgust, 2013.
20. S. D. Zarić, G. V. Janjić, D. Sredojević, D. Ž. Veljković, J. Andrić, D. Ninković, D. Vojislavljiavić, P. Petrović, Noncovalent interactions in systems with aromatic molecules and metal ions, Modeling Interactions in Biomolecules, Marianske Lazne, Czech Republic, 16-19. Septembar, 2013.
21. D. P. Malenov, D. B. Ninković, G. V. Janjić, J. M. Andrić, D. Ž. Veljković, D. N. Sredojević, S. D. Zarić, Parallel interactions of aromatic molecules at large horizontal displacements, ChemCYS 2014, The Chemistry Conference for Young Scientists, , 2014.
22. D. P. Malenov, J. M. Andrić, D. Z. Vojislavljević-Vasilev, G. V. Janjić, D. B. Ninković, A. Kapor, S. D. Zarić, The influence of metal ion coordination on noncovalent interactions of water, ChemCYS 2014, The Chemistry Conference for Young Scientists, ,2014.
23. S. D. Zarić, G. V. Janjić, V. B. Medaković, D. Ž. Veljković, J. M. Andrić, D. B. Ninković, D. Z. Vojislavljević-Vasilev, P. V. Petrović, Interactions of non-coordinated water and aqua complexes with water and benzene, WATOC 2014, 10th Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists, ,2014.
24. S. D. Zarić, G. V. Janjić, D. Ž. Veljković, J. M. Andrić, D. B. Ninković, D. Z. Vojislavljević-Vasilev, P. V. Petrović, D. P. Malenov, Interactions of phenyl rings in proteins, WATOC 2014, 10th Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists, ,2014.
25. P. V. Petrović, G. V. Janjić, D. B. Ninković, Snežana D. Zarić, Stacking interactions of systems with chelate rings, Suprachem@Balkans.eu, Summer School on Applied Supramolecular Chemistry, Belgrade, Avgust, 2014.

26. S. Đurđević, G. V. Janjić, D. B. Ninković, D. Ž. Veljković, J. M. Andrić, D. P. Malenov, S. D. Zarić, Crystallographic and quantum-chemical analysis of stacking interaction with benzene molecule, Suprachem@Balkans.eu, Summer School on Applied Supramolecular Chemistry 2014, Belgrade, Avgust, 2014.
27. D. Zarić, G. V. Janjić, V. B. Medaković, D. N. Sredojević, D. B. Ninković, D. Z. Vojislavljević-Vasilev, D. P. Malenov, Non-covalent interactions between metal complexes and aromatic rings, Modeling and Design of Molecular Materials, Wrocław, Poland, 2014.
28. S. D. Zarić, G. V. Janjić, D. N. Sredojević, D. B. Ninković, J. M. Andrić, D. Ž. Veljković, Influence of hydrogen bonds on non-covalent interactions of aromatic molecules, Modeling and Design of Molecular Materials 2014, Wrocław, Poland, 2014.

2.2.6 Саопштења са домаћих скупова штампана у изводу М64: 11

Укупно бодова М64 = 11x0,2 = 2,2

1. D. Ninković, P. Petrović, G. Janjić, S. Zarić, Crystal packing in crystal structures of metal complexes with 1,10-phenanthroline ligands, 46th Meeting of Serbian Chemical Society, Beograd, Februar, 2008.
2. D. Ninković, P. Petrović, G. Janjić, S. Zarić, Study of Stacking Interactions in Crystal Structures in Square-planar and Tetrahedral Metal Complexes With Phenanthroline Ligands, XV Konferencija Srpskog Kristalografskog Društva, Donji Milanovac, Jul, 2008.
3. D. B. Ninković, G. V. Janjić, D. Ž. Veljković, D. N. Sredojević, S. D. Zarić, Crystallographic and quantum-chemical analysis of the interactions between benzene molecules with mutual parallel alignment, XVIII Konferencija Srpskog Kristalografskog Društva, Fruška Gora, Jun, 2011.
4. J. M. Andrić, D. B. Ninković, G. V. Janjić, S. D. Zarić, Study of interactions between non-coordinated pyridine molecules, XVIII Konferencija Srpskog Kristalografskog Društva, Fruška Gora, Jun, 2011.
5. J. M. Andrić, M. Milovanović, G. V. Janjić, D. B. Ninković, S. D. Zarić, Strong hydrogen bonds of coordinated water. Influence of metal cation on water hydrogen bonds, XIX Konferencija Srpskog Kristalografskog Društva, Bela Crkva, Maj, 2012.
6. D. M. Stanković, S. S. Đurđević, M. D. Radulović, D. B. Ninković, G. V. Janjić, S. D. Zarić, MLXH/ π interactions in crystal structures, XIX Konferencija Srpskog Kristalografskog Društva, Bela Crkva, Maj, 2012.
7. D. N. Sredojević, D. B. Ninković, G. V. Janjić, S. D. Zarić, Stacking interactions of [Ni(acac)₂] complex and benzene. Quantum-chemical analysis of the interactions, XIX Konferencija Srpskog Kristalografskog Društva, Bela Crkva, Maj, 2012.
8. D. P. Malenov, G. V. Janjić, D. B. Ninković, J. M. Andrić, D. Ž. Veljković, D. N. Sredojević, S. D. Zarić, Noncovalent interactions of hazardous aromatic compounds, 6th Symposium Chemistry and Environmental Protection, Vršac, Maj, 2013.
9. D. P. Malenov, G. V. Janjić, D. Z. Vojislavljević-Vasilev, D. Ž. Veljković, D. B. Ninković, S. D. Zarić, The influence of metal ions on interactions of water with aromatic pollutants, 6th Symposium Chemistry and Environmental Protection, Vršac, Maj, 2013.
10. G. V. Janjić, D. B. Ninković, D. Ž. Veljković, D. N. Sredojević, S. D. Zarić, Interactions of aromatic molecules at large horizontal displacements, XX Konferencija Srpskog Kristalografskog Društva, Avala, Beograd, Jun, 2013.

11. S. D. Zarić, D. B. Ninković, J. M. Andrić, What are the preferred horizontal displacements of aromatic-aromatic interactions? , XXI Conference of Serbian Crystallographic Society, 2014.

2.2.6 Докторска дисертација, M71: 1

Укупно бодова M71 = 1x6 = 6

Dragan B. Ninković: „Paralelne nekovalentne interakcije aromatičnih i alifatičnih molekula”, Hemijski fakultet, Beograd, 2014.

3. АНАЛИЗА ПУБЛИКОВАНИХ РАДОВА НАКОН ИЗБОРА У ЗВАЊЕ НАУЧНИ САРАДНИК

Истраживачки рад Др Драгана Нинковића је усмерен на теоријска испитивања нековалентних интеракција, а поред тога се бавио и теоријским испитивањима механизма каталитичких реакција. Објављени радови могу се по тематици сврстати у три групе.

Првој групи припадају теоријски радови M21a-3; M21-1; M21-2, M21-3, M21-5, M21-5, M21-6, који се баве нековалентним интеракцијама.

M21a-3

Овај рад је наставак испитивања интеракција на великом растојању и бави се њиховом природом и специфичношћу. Предходно је показано да су циклохексан-бензен интеракције снажније од бензен-бензен интеракција али када се систем помера хоризонтално бензен-бензен задржава своју привлачну интеракцију, чак 70% максималне јачине интеракције је очувано, док код циклохексан-бензен интеракција тај број спада на 40% од максималне интеракције. Показано је да се посматрањем површина у којима ова два типа интеракција имају јачину интеракције већу од 2,0 kcal/mol, бензен-бензен интеракција има 2,5 већу површину. Ово указује на то да се ароматични молекули препознају на великим растојањима и да та појава може да објасни њихову важност за савијање протеина и супрамолекулске структуре. Урађене су SAPT анализе интеракција на различитим офсетима и на основу резултата се дошло до увида у природу самих интеракција.

M21-1

У овом раду се испитује да ли се може користити теорија функционала густине са корекцијом за дисперзију, за испитивање интеракција металних хелата са бенzenом. Прво су израчунате веома тачне енергије интеракција за стекинг интеракције између бензена и хелата бакра или никла. За то је коришћена метода која се узима као златни

стандард тј. CCSD(T)/CBS метода. Потом су ови подаци упоређени са функционалима којима је додата корекција за дисперзију. Показало се да је најбољи функционал за моделовање стекинга бензена са хелатима никла M06HF/D3 са def2-TZVP базним сетом и B3LYP/D3 са def2-TZVP или aug-cc-pVDZ базним сетом. Док се за моделовање стекинга бензена и хелата бакра најбоље показао PBE0/D3 функционал са def2-TZVP базним сетом. M06L/D3 са aug-cc-pVDZ даје задовољавајуће резултате за оба хелата. Иако се већина функционала може користити за органске молекуле у овом случају већина тестираних функционала не даје задовољавајуће резултате у поређењу са CCSD(T)/CBS методом, иако оба хелата немају неспарене електроне. Овим је показано да се мора бити обазрив приликом избора метода за хелате метала.

M21-2

У овом раду су проучаване интеракције циклохексана са бенzenом и поређене су са интеракцијама два бензена. Ове интеракције су проучаване у кристалним структурама из Кембричке банке података као и на основу *ab initio* прорачуна. Израчунато је да је најјача циклохексан-бензен интеракција израчуната веома тачном CCSD(T)/CBS методом јача од бензен-бензен стекинг интеракције за око 0,5 kcal/mol. Ова интеракција је јача и од најјаче бензен-бензен интеракције у Т геометрији, као и од интеракције два циклохексана. На основу мапе електростатичког потенцијала и геометрије у којима циклохексан и бензен интерагују, дата су објашњења за јачине интеракција. Овим је показано да алифатично-ароматичне интеракције могу бити веома значајне и чак јаче од ароматично-ароматичних интеракција које се често анализирају, док се алифатично ароматичне интеракције занемарују.

M21-3

Улога ароматичних и неароматичних аминокиселина у формирању амилоида, проучавана је рачунањем енергија интеракција између β-плочица у модел системима амилоида користећи *ab initio* прорачуне (B3LYP/D3/6-31G*). Коришћени су модели системи настали из кристалних структура са додатим и оптимизованим недостајућим атомима водоника. Модел системи су разврстани у две групе, једна која садржи ароматичне аминокиселине и друга која не садржи. Показано је да ова два типа амилоида имају сличне енергије интеракција што је у сагласности са експерименталним подацима који указују да ароматичне аминокиселине нису есенцијалне за формирање амилоида. Поред овога утврђено је да различити фактори стабилизују амилоиде са ароматичним прстеновима и амилоиде без ароматичних прстенова. До ових закључака се дошло када су се раздвојили различити доприноси које могу да имају различити делови структуре. Код амилоида који садрже ароматичне аминокиселине оне значајно доприносе јачини интеракција између аминокиселинских остатака, при томе је примећено да алифатично-ароматичне интеракције дају највећи допринос, па ароматично-ароматичне, а алифатично-алифатичне имају најмањи допринос. Код амилоида са неароматичним аминокиселинама највећи допринос имају интеракције алифатичних остатака са другим ланцем. На овај начин је показано да

иако имају сличне јачине интеракција ова два типа амилоида имају потпуно другачији начин везивања.

M21-5

У кристалним структурама из Кембричке банке података испитиване су стекинг интеракције између два фенола (у претрази је коришћен пара-фенол због малог броја несупституисаних фенола) и два толуена. Примећено је да су и код ових интеракција најдоминантније структуре код којих се молекули налазе на великом хоризонталном растојању (офсету) исто као и код бензен-бензен интеракције. Ове интеракције на великим офсетима у кристалним структурама су стабилизоване додатним симултаним интеракцијама. Стекинг интеракције код пара-фенола су оријентисане паралелно и антипаралелно, док толуен-толуен стекинг интеракција скоро искључиво има антипаралелну оријентацију. Ови подаци су у сагласности са израчунатим енергијама интеракција. Разлика код јачина интеракција између паралелних и антипаралелних је мала код димера фенола, а значајно велика код димера толуена. Ове интеракције су доста јаче од бензен-бензен интеракција што је последица присуства супституената који граде додатне интеракције. Примећено је да на великим растојањима још увек постоји значајна интеракција од око 2 kcal/mol као и код бензен-бензен интеракција.

M21-6

У кристалним структурама у којима се налази вода посматрана је геометрија воде. Кристалне структуре из Кембричке банке података показују велике опсеге за дужине веза и углове у молекулима воде. На основу веома прецизних резултата добијених CCSD(T) методом са aug-cc-PV6Z базис сетом, добија се да је код оптимизоване структуре угао у води $104,4^\circ$ а дужина везе $0,958 \text{ \AA}$, што се слаже са експерименталним резултатима. Потенцијална површина воде показује да вода може да има углове од $96,4$ до $112,8$, и дужине веза од $0,930 \text{ \AA}$ до $0,989 \text{ \AA}$ а да се при томе енергија воде не промени више од 1,0 kcal/mol. Статистички подаци из кристалографских структура показују да је угао код већине вода близак тетраедралном углу ($109,4^\circ$). Прорачунима је доказано да се мала промена у енергији воде може надокнадити чак и повољнијим интеракцијама које та иста вода гради са новим углом.

Другој групи припадају теоријски радови M21a-1 и M22-1, који се баве механизмима каталитичких реакција.

M21a-1

У овом раду су испитиване модификације титанијум неопентилиденског комплекса $((\text{PNP})\text{Ti}=\text{CHtBu}(\text{CH}_2\text{tBu}))$, $\text{PNP}=\text{N}[2\text{-PiPr2-4-methylphenyl}]_2$ који је у стању да активира sp^2 и sp^3 C-H везу. Поред активације C-H везе посматрана је и конкуренција између повратне апстракције водониковог атома и реакције таутомеризације производа реакције која даје терминални метилиден. Испитиван је утицај модификације лиганда на саму реакцију. Модификације које су требале да изазову промене путем електронског ефекта нису имале утицај или су имале занемарујући утицај. Док је употреба већих група које изазивају стерно нагомилавање на активном месту повољно

утицала на реакцију тј. снижавају баријере активације метана и реакције таутомеризације. Модификација PNP лиганда тако што се азот мења у фосфор доводи до снижавања баријере за таутомеризацију.

M22-1

У овом раду је испитиван механизам реакције у којој титанијум неопентилиденски комплекс $((\text{PNP})\text{Ti}=\text{CHtBu}(\text{CH}_2\text{tBu}))$, $\text{PNP}=\text{N}[2\text{-PiPr}_2\text{-4-methylphenyl}]_2$ може да активира sp^2 and sp^3 C–H везе. Овај комплекс може да активира ове везе при благим условима. За изучавање механизма реакција коришћен је новији функционал ωB97XD који садржи корекцију за дисперзију. Механизам реакције који је добијен је сличан механизму који је раније израчунат али је пронађен нови конформер који је истовремено стабилнији и кинетички више реактиван. Механизам који се састоји из четири корака је веома сличан за бензен и метан. Међутим постоји разлика у највишој баријери, код метана је то задња, а код бензена је то прва баријера. Осим механизма активације изучаван је процес таутомеризације при коме се из прозвода добија терминални метилиден $(\text{PNP})\text{TiCHtBu}(=\text{CH}_2)$. Пошто је баријера за таутомеризацију слична повратној реакције апстракције водониковог атома ово указује да се ови системи могу користити за изучавање реактивности терминалних метилидена. Поред овога испитиван је и утицај корекција за дисперзију, показано је да ове корекције имају фундаментални значај за тачно моделовање ове реакције.

Трећој групи припадају радови који су настали у сарадњи са иностраним експерименталним групама M21a-2 и M21-4, који се баве механизмима каталитичких реакција.

M21a-2

Из сарадње са експерименталном групом са Тексас A&M универзитета у Катару добијени су резултати који се баве материјалима који могу да емитују угљен-моноксид (CO). Ови материјали могу да имају примену у клиничким испитивањима уколико се омогући контролисано ослобађање. Понађено је полимерно једињење које применом зелене светлости слабог интензитета ослобађа CO. Применом временски зависне теорије густине функционала симулирани су електронски прелази и дат је увид у природу екстинкција. Показано је и да се може направити растегљив материјал употребом поли-тетра-флороетилена који може да се угради ово једињење и тако настали материјал се може користити као складиште CO.

M21-4

Дводимензионалне мреже засноване на тетрабромобензен-1,4-дикарбоксилној киселини настају захваљујући дирекционом ефекту халогеног везивања ($\text{Br}\cdots\text{O}$ и $\text{Br}\cdots\pi$ интеракције). Ово једињење даје 100% принос за формирање дводимензионалних мрежа. Ове дводимензионалне структуре могу да задржавају у себи раствараче као што су ацетон, етанол, диметил-сулфоксид и етилен гликол у различитим стехиометријским односима. Сви растварачи показују значајне сличности у дводимензионалној структури

и вредности растојања између два слоја значајно зависи од величине, облика, конформације молекула и способности интеркалирајућег растварача да гради водоничне везе. Утврђено је да је могуће извући растварач из ових структура и да је тај процес реверзибилан. Теориским *ab initio* прорачунима је израчунато је да се енергије Br...O халогених веза крећу у опсегу од -0,6 до 1,7 kcal/mol. Урађене су и Hirshfeld-ове анализе површина да би се утврдили начини интераговања растварача.

ПЕТ НАЈЗНАЧАЈНИЈИХ НАУЧНИХ ОСТВАРЕЊА КАНДИДАТА У ПЕРИОДУ ИЗБОРА У НАУЧНО ЗВАЊЕ научни сарадник:

Цитиран 38 пута (без аутоцитата)

1. Dragan B. Ninković, Salvador Moncho, Predrag V. Petrović, Snežana D. Zarić, Michael B. Hall, Edward N. Brothers, Methane Activations by Titanium Neopentylidene Complexes: Electronic Resilience and Steric Control, *Inorganic Chemistry*, 56, 15, 9264 – 9272 (2017)

<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.inorgchem.7b01340>

Импак фактор часописа (2016): **4,857**, „Chemistry, Inorganic & Nuclear“ 4/46, **M21a**

Цитираност „Scopus“ (без аутоцитата): 3

М нормирано= 8,33

2. Upendar Reddy Gandra, Alessandro Sinopoli, Salvador Moncho, Manjula NandaKumar, Dragan B. Ninković, Snežana D. Zarić, Muhammad Sohail, Saeed Al-Meer, Edward N. Brothers, Nayef A. Mazloum, Mohammed Al-Hashimi, Hassan S. Bazzi, Green Light-Responsive CO-Releasing Polymeric Materials Derived from Ring-Opening Metathesis Polymerization, *ACS Applied Materials & Interfaces*, 11, 37, 34376 – 34384 (2020)

<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acsami.9b12628>

Импак фактор часописа(2018): **8.456**, „Materials Science, Multidisciplinary“ 27/273, **M21a**

Цитираност „Scopus“ (без аутоцитата): 4

М нормирано= 5

3. Dragan B. Ninković, Jelena P. Blagojević, Edward N. Brothers, Michael B. Hall, Snežana D. Zarić, What Is Special about Aromatic-Aromatic Interactions? Significant Attraction at Large Horizontal Displacement, *ACS Central Science*, 6, 3, 420–425 (2020)

<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acscentsci.0c00005>

Импак фактор часописа (2018): **12,837**, „Chemistry, Multidisciplinary“ 15/172 **M21a**

Цитираност „Scopus” (без аутоцитата): 1

М нормирано= 10

4. Dušan P. Malenov, Dragan B. Ninković, Snežana D. Zarić, Stacking of Metal Chelates with Benzene: Can Dispersion-Corrected DFT Be Used to Calculate Organic-Inorganic Stacking?, ChemPhysChem, 16, 761 – 768 (2015)

<https://chemistry-europe.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/cphc.201402589>

Импак фактор часописа(2014): **3,419**, „Physics, Atomic, Molecular & Chemical“7/34, **M21**

Цитираност „Scopus” (без аутоцитата): 11

М нормирано= 8

5. Dragan B. Ninković, Dubravka Z. Vojislavljević-Vasilev, Vesna B. Medaković, Michael B. Hall, Edward N. Brothers, S. D. Zaric, Aliphatic-aromatic stacking interactions in cyclohexane-benzene are stronger than aromatic-aromatic interaction in the benzene dimer, Physical Chemistry Chemical Physics, 18, 37, 25791 - 25795 (2016)

<https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2016/CP/C6CP03734H#!divAbstract>

Импак фактор часописа (2015): **4,449**, Physics, Atomic, Molecular & Chemical 6/35, **M21**

Цитираност „Scopus” (без аутоцитата): 19

М нормирано= 6,67

4. КВАЛИТАТИВНА ОЦЕНА НАУЧНОГ ДОПРИНОСА

1. ПОКАЗАТЕЉИ УСПЕХА У НАУЧНОМ РАДУ

Чланства у одборима научних друштава; чланства у уређивачким одборима часописа, уређивање монографија, рецензије научних радова и пројеката

Рецензије научних радова

Др Драган Нинковић је рецензирао три рада у међународним научним часописима са ISI SCI листе:

- 1 x Journal of molecular modeling
- 2 x Chemical papers

Ангажованост у развоју услова за научни рад, образовању и формирању научних кадрова:

Допринос развоју науке у земљи

Научни рад др Драгана Нинковића усмерен је на истраживања у областима теоријске хемије тј, теоријском испитивању нековалентних интеракција. Из резултата истраживања током израде докторске дисертације произишле су четири публикације и један део започетих истраживања, која се односе на испитивање интеракција малих ароматичних молекула помоћу *ab initio* прорачуна и статистичке обраде података у Кембричкој банци кристалних структура. Један рад је објављен у међународном часопису изузетне вредности (M21a-4), а остала три су објављена у врхунским међународним часописима (M21-10, M21-11, M21-15), треба истаћи да су ови радови цитирани 136 пута и са укупним импакт фактором од 14,828. Резултати докторске дисертације дају оригинални научни допринос испитивању нековалентних интеракција и њиховом разумевању. Ови резултати су први резултати који су указали на значај паралелних интеракција ароматичних прстенова са великим хоризонталним померањима у протеинима и између хетероароматичних молекула, а указали су и на значај ароматично-алифатичних интеракција.

Кандидат се наставио успешно бавити унапређењем разумевања нековалентних интеракција. Као доказ тога су радови M21a-3; M21-1; M21-2, M21-3, M21-5, M21-5, M21-6. Најистакнутији рад M21a-3 је објављен у часопису ACS Central Science са импакт фактором 12,837.

Др Драган Нинковић је успешно остварио и међународну сарадњу са експерименталним групама из Катара и Тајланда са којима има радове M21a-2 и M21-4. Током свог боравка на постдокторском усавршавању остварио је и сарадњу са професором Michael B. Hall Тексас А&М универзитета из САД и професором Edward N. Brothers са Тексас А&М универзитета у Катару што се види из радова M21a-1 и M22-1 који се баве механизмима каталитичких реакција. Сарадњу са овим професорима је наставио и после постдоктората.

Учешће на пројектима:

1. 01. 01.2011. – 31. 12. 2019. „Нековалентне интеракције π -система и њихова улога у молекулском препознавању” OI172065, пројекат финансирао Министарство просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије. Руководилац пројекта: Др Снежана Д. Зарић, редовни професор Хемијског факултета, Универзитета у Београду.

2. 01. 07. 2015. – 31. 4. 2018. “Computational Investigation of Carbon-Hydrogen Bond” NPRP 7-297-1-051, пројекат финансирао Qatar National Research Fund. Руководиоци пројекта: Edward N. Brothers, Тексас А&М универзитет у Катару и Др Снежана Д. Зарић, гостијући професор на Тексас А&М универзитету у Катару и редовни професор Хемијског факултета, Универзитета у Београду.

3. 01. 01. 2012 – 31. 12. 2014 " Supramolecular training for students and young researchers in the Balkan area " , пројекат је финансиран од Швајцарске националне научне фондације. Руководилац пројекта: Др Снежана Д. Зарић, редовни професор Хемијског факултета, Универзитета у Београду.

Менторство при изради мастер и докторских радова

Кандидат је учествовао у руковођењу израде једног завршног рада и био је члан комисије за преглед и одбрану више завршних и мастер радова.

Педагошки рад

Током свог рада др Драган Нинковић је био ангажован за извођење вежби као сарадник на курсу Рачунарска хемија, за студенте ИВ године студијског програма хемичар, у току школске 2012/2013. и 2013/2014. године.

Међународна сарадња

- Као стипендиста ДААД фондације боравио је на Макс Планк институту за хемијску физику чврстог стања у Дрездену, Немачка, у периоду од 1. јула до 31. јула 2009. године.
- Као стипендиста ДААД фондације боравио је на Макс Планк институту за хемијску физику чврстог стања у Дрездену, Немачка, у периоду од 1. септембра до 30. новембра 2010. године.
- Био је ангажован на пројекту " Supramolecular training for students and young researchers in the Balkan area " (од 2012. до 2014. године, финансиран од Швајцарске националне научне фондације). Као учесник овог међународног пројекта боравио је на Департману за хемију Универзитета у Фрибургу, Швајцарска, у периоду од 1. фебруара до 31. марта 2013. године.
- Био је на посдокторком усавршавању на Тексас А&М универзитету у Катару. Радио на пројекту "NPRP 7-297-1-051" Катарског националног истраживачког фонда под називом "Computational Investigation of Carbon-Hydrogen Bond Activation" од 1. јула 2015. до 31. априла 2018. године.

Учешће у комисијама

Члан комисије за избор у звање научни сарадник др Дубравке Војислављевић-Василев, др Милана Миловановића, и др Јелене Благојевић-Филиповић.
Члан комисије за избор у звање истраживач сарадник др Дубравке Војислављевић-Василев.

5. ОРГАНИЗАЦИЈА НАУЧНОГ РАДА

Руковођење пројектним задацима

У оквиру пројекта ОИ172065 др драган Нинковић руководио је пројектним задатком „Ароматично-ароматичне и ароматично-алифатичне стекинг интеракције малих органских молекула“

6. КВАЛИТЕТ НАУЧНИХ РЕЗУЛТАТА

Утицајност

Утицајност публикованих научних резултата огледа се у њиховој цитираности. Према подацима научне базе Scopus, јул, 2020.године, радови др Драгана Нинковића цитирани су укупно 285 пута (без аутоцитата), док је Хиршов индекс 9 (без аутоцитата) према истом извору. Највећу цитираност без аутоцитата имају следећи радови:

Рад	Цитираност (без аутоцитата)
M21a-4	52
M21-7	46
M21-15	32
M21-11	29
M21-9	22
M21-14	20
M21-2	19
M21-1	11
M21-13	10
M21-8	9
M21-10	9
M21-12	9

Параметри квалитета часописа и позитивна цитираност кандидатових радова

Параметри квалитета часописа у којима су публиковани радови су приказани у списку радова кроз категорију часописа и импакт фактор. Др Драган Нинковић је у свом целокупном научном раду од 2010. године публиковао 4 рада из категорије M21a, 15 радова из категорије M21, 1 рад из категорије M22, 1 рад из категорије M23. У периоду од избора у звање научни сарадник, 2015. године до данас, објавио је 3 рада из категорије M21a, 6 радова из категорије M21 и 1 рад из категорије. Укупан М

коэффициент за овај изборни период 2015-2020 године, износи **M=75,17**. Радови са највећим импакт фактором су M21a-2 (ИФ 8,456) и M21a-3 (ИФ 12,837)

Ефективни број радова и број радова нормиран на основу броја коаутора

Ефективни број радова и број радова нормиран на основу броја коаутора. На основу критеријума који су дати у Правилнику о поступку и начину вредновања и квантитативном исказивању научноистраживачких резултата, радови M21a-3, M21-1, M21-5 и M21-6 који су публиковани са највише 5 коаутора не подлежу нормирању и признају се са пуном тежином. У шест публикованих радова потребно је извршити нормирање. Радови M21a-1, M21-2, M21-3 M21-3 спадају у категорију нумеричких симулација и настали су у сарадњи са иностраним коауторима су нормирани у односу на максималан број коаутора 5. А радови M21a-2 и M21-4 који су настали и међународне сарадње са експерименталним групама нормирани су на максималан број коаутора 7.

Степен самосталности и степен учешћа у реализацији радова у научним центрима у земљи и иностранству

Др Драган Нинковић показује висок степен самосталности у научноистраживачком раду. Он је учествовао у свим фазама реализације објављених радова - у осмишљавању и реализацији рада, анализи и интерпретацији добијених резултата и писању публикација. Кандидат је као први аутор објавио укупно 9 радова (три рада M21-a , пет радова M21 и један M22 категорије), од избора у научног сарадника 5 радова (два рада M21-a, три рада M21). Кандидат је као коаутор на 12 радова поред дискусије резултата и учешћа у писању рада учествовао у осмишљавању и реализацији рада.

7. ИСПУЊЕНОСТ УСЛОВА ЗА СТИЦАЊЕ ПРЕДЛОЖЕНОГ НАУЧНОГ ЗВАЊА НА ОСНОВУ КОЕФИЦИЈЕНАТА М

Минимални Квантитативни захтеви за стицање научног звања виши научни сарадник

За природно-математичке и медицинске науке

Диференцијални услов – од првог избора у претходно звање до избора у звање	Потребно је да кандидат има најмање поена, који треба да припадају следећим категоријама:		
Виши научни сарадник	Укупно	50	75,17
Обавезни (1)	M10+M20+M31+M32+M33+M41+M42+M90	40	68,17
Обавезни (2)	M11+M12+M21+M22+M23	30	68,17

8. ОЦЕНА КОМИСИЈЕ О НАУЧНОМ ДОПРИНОСУ КАНДИДАТА СА ОБРАЗЛОЖЕЊЕМ

На основу свега изложеног и личног увида у рад кандидата може се констатовати да је др Драган Нинковић, дипл. хемичар, доктор хемијских наука, научни сарадник Иновационог центра Хемијског факултета у Београду остварио запажене резултате у научно-истраживачком, стручном и педагошком раду. Током своје досадашње научно-истраживачке каријере др Драган Нинковић је објавио 21 научни рад категорисан према Правилнику о поступку, начину вредновања и квантитативном исказивању научноистраживачких резултата, са укупним $M=151,34$ и укупним импакт фактором 87,420.

Након избора у звање научни сарадник, кандидат је објавио 10 радова, а од тога: 3 у међународним часописима изузетних вредности (M21a), 6 рад у врхунским међународним часописима (M21), 1 рад у истакнутом међународном часопису (M22), са укупним $M=68,17$ и укупним импакт фактором $=52,684$.

Утицајност публикованих научних резултата др Драгана Нинковића огледа се у њиховој цитираности. Према подацима научне базе Scopus, јула, 2020 године, радови кандидата цитирани су укупно 285 пута без аутоцитата. Према истом извору, Хиршов индекс објављених резултата износи 9 (без аутоцитата). Посебно се истичу радови из теоријске хемије M21a-4, M21-7 који су високо цитирани радови (M21a-4 52 пута цитиран, док је рад M21-7 46 пута). Радови су цитирани у позитивном смислу што указује на квалитет радова као и њихову утицајност на научну област којом се кандидат бави. Др Драган Нинковић је учествовао у реализацији пројекта основних истраживања које је финансирало Министарство за науку и технолошки развој Републике Србије, једног пројекта Катарског националног истраживачког фонда и једног мултилатералног пројекта које је финансирала Швајцарска национална научна фондација.

Сви наведени резултати недвосмислено показују да др Драган Нинковић показује висок степен самосталности и зрелости у научним истраживањима у области неорганске хемије.

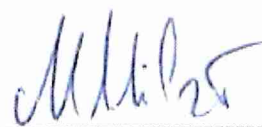
На основу прегледаног материјала и приложених резултата, Комисија сматра да кандидат испуњава све потребне критеријуме и на основу тога са задовољством предлаже Научном већу Хемијског факултета, Универзитета у Београду да прихвати овај Извештај и да донесе позитивну одлуку о избору др Драгана Нинковића у **звање виши научни сарадник**.

У Београду, 10. јула 2020.

Проф. Др Снежана Зарић, редовни професор

Хемијски факултет,

Универзитет у Београду



Проф. Др Милош Милчић, ванредни професор

Хемијски факултет,

Универзитет у Београду



Др Горан Богдановић, научни саветник

Институт за нуклеарне науке „Винча“