

Универзитет у Београду
ХЕМИЈСКИ ФАКУЛТЕТ

ПРИМЉЕНО: 30-12-2022			
Орг. јав.	Епој	Примљ.	Бројности
		110113	

**НАСТАВНО НАУЧНОМ ВЕЋУ
УНИВЕРЗИТЕТА У БЕОГРАДУ – ХЕМИЈСКОГ ФАКУЛТЕТА**

На VIII редовној седници Наставно-научног већа Универзитета у Београду – Хемијског факултета, одржаној 8.12.2022. године, изабрани смо у Комисију референата (одлука број 1101/2) за избор др Милана Сенђанског у звање НАУЧНИ САВЕТНИК.

На основу прегледа приложеног материјала, као и личног увида у досадашњи истраживачки рад др Милана Сенђанског, а у складу са члановима 75 и 76 Закона о научноистраживачкој делатности ("Сл. Гласник РС" бр. 49/2019) и Правилником о поступку, начину вредновања и квантитативном исказивању научноистраживачких резултата истраживача ("Сл. Гласник РС" бр. 159/2020-82), извршили смо оцену научног и стручног рада кандидата, те Наставно-научном већу подносимо следећи

ИЗВЕШТАЈ

І БИОГРАФСКИ ПОДАЦИ

Милан Сенђански је рођен 15.2.1985. године у Београду, где је завршио основну школу и Земунску гимназију. Дипломирао је на Хемијском факултету Универзитета у Београду 2008. године као студент генерације (место је поделио са Илијом Цвијетићем), са просечном оценом 9,17. Исте године је уписао докторске студије на Факултету за физичку хемију и 30.12.2011. одбранио докторску тезу са темом „Ab initio рачунање вибрационо-ротационих нивоа и партиционих функција за основно електронско стање ВС2“ код редовног члана САНУ проф. др Миљенка Перића. У звање научни сарадник је изабран 26.12.2012. године (одлука бр. 06-00-75/954 Комисије за стицање научних звања МПНТР Републике Србије). У звање виши научни сарадник је изабран 11.07.2018. године (одлука бр. 660-01-00006/572 Комисије за стицање научних звања МПНТР Републике Србије).

Кандидат је тренутно запослен у предузећу Sixsentix d.o.o. Пре тога је био запослен у ИНН „Винча“ (2015 – 2022) године, у Иновационом центру Хемијског факултета у Београду д.о.о. (2009-2015) и у Институту за мултидисциплинарна истраживања и инжењеринг (мај – октобар 2009).

ІІ БИБЛИОГРАФИЈА

Др Милан Сенђански је до сада објавио 42 научна рада, од тога 40 радова категорије M20, један M10 (поглавље у књизи M12) и један некатегорисан рад (препознатљив у SCOPUS-у, цитиран у часопису Nature (Veljkovic, V et al. (2015) F1000Research, 4, art. no. 104, <https://doi.org/10.12688/f1000research.6436.1>), као и 21 саопштења на националним и међународним скуповима. Кандидат је током каријере 15 пута био први аутор или аутор задужен за кореспонденцију. Према бази података Scopus, на дан 18.12.2022., укупна цитираност иноси 454, од тога 420 без аутоцитата, док број хетероцитата износи 339. Хиршов индекс (h-индекс) цитираности износи 10.

Након избора у звање вишег научног сарадника, др Милан Сенђански је објавио један рад из категорије M10 – један M14, 19 научних радова из категорије M20, од којих је један рад публикован у међународном часопису изузетних вредности (категирија M21a), дванаест радова у врхунским међународним часописима (M21), и шест радова у истакнутим међународним часописима (M22). Након избора у звање виши научни сарадник, збир импакт фактора (ИФ) свих објављених радова у којима је кандидат коаутор износи 77,498 уз просечан ИФ рада од 4,078. Од избора у звање виши научни сарадник кандидат је објавио шест саопштења на међународним научним скуповима штампаним у изводу (M34). Радови др Милана Сенђанског су распоређени у три групе (I, II и III), хронолошки према стицању научних звања.

I - БИБЛИОГРАФСКИ ПОДАЦИ ДО ИЗБОРА У ЗВАЊЕ НАУЧНИ САРАДНИК

I-M21a Рад у међународном часопису изузетних вредности **1x10**
= 10

1. R. Vujasin, **M. Sencanski**, J. Radic-Peric, M. Peric: A Comparison of Various Variational Approaches for Solving the One-dimensional Vibrational Schroedinger Equation, *Match: Communications in Mathematical and in Computer Chemistry* (2010), 63(2), 363-378. IF₂₀₀₈ = 3,500. Kategorija: Chemistry, Multidisciplinary 23/127 (M21) Computer Science, Interdisciplinary Applications 5/94 (M21a), Mathematics, Interdisciplinary Applications 4/76 (M21a)

url: https://match.pmf.kg.ac.rs/electronic_versions/Match63/n2/match63n2_363-378.pdf

Бр. поена 10

I-M23 Рад у међународном часопису **4x3**
= 12

1. Jerosimic, Stanka V.; **Sencanski, Milan V.**; Radic-Peric, Jelena B. Ab initio investigation of the ground X 2 A' [X 2 A 1] and low-lying excited electronic states of C2B. *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* (2010), 944(1-3), 53-60 IF₂₀₁₀ = 1,288 Kategorija: Chemistry, Physical 88/127 (M23)

<https://doi.org/10.1016/j.theochem.2009.12.020>

Бр. поена 3

2. **Milan V. Senćanski**, Jelena Radić-Perić, Miljenko Perić: On the relationship between molecular spectroscopy and statistical mechanics: calculation of partition functions for triatomic molecules undergoing large-amplitude vibrations, *J. Serb. Chem. Soc.* 76 (4) 539-555 (2011). IF₂₀₁₁: 0,879 Kategorija: Chemistry, Multidisciplinary 103/154 (M23)

<https://doi.org/10.2298/JSC101126052S>

Бр. поена 3

3. **Milan V. Senćanski**, Ljiljana Stojanović, Stanka Jerosimić, Jelena Radić-Perić, Miljenko Perić: On the relationship between molecular spectroscopy and statistical mechanics: calculation of vibrational-rotational energy levels and partition functions in ground electronic state of BC₂, *J. Serb. Chem. Soc.* 76 (4) 557-573 (2011). IF₂₀₁₁: 0,879 Kategorija: Chemistry, Multidisciplinary 103/154 (M23)

<https://doi.org/10.2298/JSC101126053S>

Бр. поена 3

4. **M. Senćanski**, M. D. Ivanović, S. Vučković and Lj. Došen-Mićović: Modeling the ligand specific m- and d-opioid receptor conformations, *J. Serb. Chem. Soc.* 76 (9) (2011) 1247-1262 (2011). IF₂₀₁₁: 0,879 Kategorija: Chemistry, Multidisciplinary 103/154 (M23)

<https://doi.org/10.2298/JSC110120110S>

Бр. поена 3

I-M34 Саопштење на скупу од међународног значаја штампано у изводу

0,5 x 1 = 0,5

1. Radojka Vujasin, **Milan Senćanski**

Ab initio calculation of the structure and partition functions of BC₂ Ninth Young Researchers Conference Materials Sciences and Engineering December 20-22, 2010, Belgrade, Serbia, p. 26.

url: <https://dais.sanu.ac.rs/bitstream/id/21875/99.pdf>

Бр. поена 0,5

I-M64 Саопштење са скупа националног значаја штампано у изводу **1x0,2**
= 0,2

1. **М. Сенћански**, М. Д. Ивановић, С. Вучковић и Љ. Дошен-Мићовић: Активне конформације μ - и δ - опиоидних рецептора специфичних за поједине лиганде, XLIX Саветовање Српског хемијског друштва, Програм и кратки изводи радова, стр. 77, Крагујевац, Србија, 13.-14. мај 2011.

Бр. поена 0,2

I-M71 Одбрањена докторска дисертација **1 x 6 = 6**

Милан Сенћански, *Ab initio* рачунање вибрационо-ротационих нивоа и партиционих функција основног електронског стања BC_2 , Факултет за физичку хемију, Универзитет у Београду, 2011.

Бр. поена 6

II - БИБЛИОГРАФСКИ ПОДАЦИ ДО ИЗБОРА У ЗВАЊЕ ВИШИ НАУЧНИ САРАДНИК

II-M21 Рад у врхунском међународном часопису

8 + 6,67 + 4 + 8 + 5,71 + 4,44 + 4 + 8 + 5,714 = 54,534

1. Fábíán, B., **Senćanski, M.V.**, Cvijetić, I.N., Jedlovszky, P., Horvai, G., Dynamics of the Water Molecules at the Intrinsic Liquid Surface As Seen from Molecular Dynamics Simulation and Identification of Truly Interfacial Molecules Analysis, 2016, *Journal of Physical Chemistry C*, 120(16), 8578-8588. IF₂₀₁₄ 4,772. Категорија: Chemistry, Physical 29/139 (M21)

<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.5b10370>

Бр. поена 8

2. Glišić, S., Cavanaugh, D.P., Chittur, K.K., **Sencanski, M.**, Perovic, V., Bojić, T. Common molecular mechanism of the hepatic lesion and the cardiac parasympathetic regulation in chronic hepatitis C infection: A critical role for the muscarinic receptor type 3, *BMC Bioinformatics* 17(1), 2016, 139. IF₂₀₁₄ = 2,576; Категорија: Mathematical & Computational Biology 11/57 (M21)

<https://doi.org/10.1186/s12859-016-0988-7>

Бр. аутора 6

Бр. поена након нормирања према формули $K/(1+0,2(n-5)) = 6,67$

3. Filipović, N.R., Bjelogrić, S., Todorović, T.R., Blagojević, V.A., Muller, C.D., Marinković, A., Vujčić, M., Janović, B., Malešević, A.S., Begović, N., **Senćanski, M.**, Minić, D.M. Ni(II) complex with bishydrazone ligand: Synthesis, characterization, DNA binding studies and pro-apoptotic and pro-differentiation induction in human cancerous cell lines, *RSC Advances* 2016, 6(110), 108726-108740. IF₂₀₁₄ = 3,840; Категорија: Chemistry, Multidisciplinary 33/157 (M21)

<https://doi.org/10.1039/c6ra24604d>

Бр. аутора 12

Бр. поена након нормирања према формули $K/(1+0,2(n-7)) = 4$

4. Glisic, S., **Sencanski, M.**, Perovic, V., Stevanovic, S., García-Sosa, A.T. Arginase Flavonoid Anti-Leishmanial in Silico Inhibitors Flagged against Anti-Targets, *Molecules* 2016, 21(5), 589. IF₂₀₁₆ = 2,861; Категорија: Chemistry, Organic 17/59 (M21)

<https://doi.org/10.3390/molecules21050589>

Бр. поена 8

5. **Sencanski, M.**, Radosevic, D., Perovic, V., Gemovic, B., Stanojevic, M., Veljkovic, N., Glisic, S. Natural products as promising therapeutics for treatment of influenza disease, *Current Pharmaceutical Design* 2015, 21(38) 5573-5588. IF₂₀₁₄ = 3,452; Категорија: Pharmacology & Pharmacy 63/255 (M21)

<https://doi.org/10.2174/1381612821666151002113426>

Бр. аутора 7

Бр. поена након нормирања према формули $K/(1+0,2(n-5)) = 5,71$

6. Veljkovic, V., Glisic, S., Muller, C.P., Scotch, M., Branch, D.R., Perovic, V.R., **Sencanski, M.**, Veljkovic, N., Colombatti, A. In silico analysis suggests interaction between Ebola virus and the extracellular matrix, *Frontiers in Microbiology*, 2015, 6, FEB 135. IF₂₀₁₅ = 4,165; Категорија: Microbiology 23/123 (M21)

<https://doi.org/10.3389/fmicb.2015.00135>

Бр. аутора 9

Бр. поена након нормирања према формули $K/(1+0,2(n-5)) = 4,44$

7. Filipović, N.R., Bjelogrić, S., Marinković, A., Verbić, T.Ž., Cvijetić, I.N., **Senčanski, M.**, Rodić, M., Vujčić, M., Sladić, D., Striković, Z., Todorović, T.R., Muller, C.D. Zn(II) complex with 2-quinolinecarboxaldehyde selenosemicarbazone: Synthesis, structure, interaction studies with DNA/HSA, molecular docking and caspase-8 and -9 independent apoptose induction, *RSC Advances*, 2015, 5, 115, 95191-95211 IF₂₀₁₄ = 3,840; Категорија: Chemistry, Multidisciplinary 33/157 (M21)

<https://doi.org/10.1039/C5RA19849F>

Бр. аутора 12

Бр. поена након нормирања према формули $K/(1+0,2(n-7)) = 4$

8. Sukalovic, V., Soskic, V., **Sencanski, M.**, Andric, D., Kostic-Rajacic, S. Determination of key receptor-ligand interactions of dopaminergic arylpiperazines and the dopamine D2 receptor homology model, *Journal of Molecular Modeling*, 2013, 19(4), 1751-1762. IF₂₀₁₂ = 1,984; Категорија: Computer Science, Interdisciplinary Applications 24/100 (M21)

<https://doi.org/10.1007/s00894-012-1731-6>

Бр. поена 8

9. **Sencanski, M.V.**, Sukalovic, V.B., Dosen-Micovic, L.I., Soskic, V., Andric, D.B., Roglic, G.M., Kostic-Rajacic, S.V. Modeling interactions of α 1a adrenergic receptor and different arylpiperazine ligands, *Digest Journal of Nanomaterials and Biostructures*, 2012, 7(4) 1761-1777. IF₂₀₁₀ = 2,079; Категорија: Materials Science, Multidisciplinary 56/225 (M21)

url: https://chalcogen.ro/1767_Sencanski.pdf

Бр. аутора 7

Бр. поена након нормирања према формули $K/(1+0,2(n-5)) = 5,714$

II-M22 Рад у истакнутом међународном часопису

5 + 3,125 + 5 + 5 + 4,167 + 5 = 27,292

1. **Milan Senčanski**, Ivana S. Djordjevic, Sonja Grubisic, Assessing the dispersive and electrostatic components of the selenium–aromatic interaction energy by DFT, *Journal of Molecular Modeling* (2017), 23, 162. IF₂₀₁₅ = 1,438; Категорија: Chemistry, Multidisciplinary 91/163 (M22), Computer Science, Interdisciplinary Applications 57/104 (M22)

<https://doi.org/10.1007/s00894-017-3330-z>

Бр. поена 5

2. Filipović, N.R., Bjelogrić, S., Portalone, G., Pelliccia, S., Silvestri, R., Klisurić, O., **Senčanski, M.**, Stanković, D., Todorović, T.R., Muller, C.D., Pro-apoptotic and pro-differentiation induction by 8-quinolinecarboxaldehyde selenosemicarbazone and its Co(III)

complex in human cancer cell lines, *MedChemComm*, 2016, 7(8), 1604-1616. IF₂₀₁₆ = 2,608; Категорија: Chemistry, Medicinal 29/60 (M22), Biochemistry & Molecular Biology 154/290 (M22)

<https://doi.org/10.1039/c6md00199h>

Бр. аутора 10

Бр. поена након нормирања према формули $K/(1+0,2(n-7)) = 3,125$

3. **Senćanski, M.**, Došen-Mićović, L. Importance of inter-residue interactions in ligand - Receptor binding, *Chemical Papers*, 2016, 70(5), iix. IF₂₀₁₄ = 1,468; Категорија: Chemistry, Multidisciplinary 79/157 (M22)

<https://doi.org/10.1515/chempap-2016-0017>

Бр. поена 5

4. **Senćanski, M.**, Došen-Mićović, L., Šukalović, V., Kostić-Rajačić, S., Theoretical insight into sulfur-aromatic interactions with extension to D₂ receptor activation mechanism, *Structural Chemistry*, 2015, 26, 1139-1149. IF₂₀₁₃ = 1,900; Категорија: Chemistry, Multidisciplinary 60/148 (M22), Chemistry, Physical 78/136 (M22), Crystallography 11/23 (M22)

<https://doi.org/10.1007/s11224-015-0574-z>

Бр. поена 5

5. **Sencanski, M.**, Sukalovic, V., Shakib, K., Soskic, V., Dosen-Micovic, L., Kostic-Rajacic, S., Molecular modeling of 5HT_{2A} receptor - Arylpiperazine ligands interactions, *Chemical Biology and Drug Design*, 2014, 83(4), 462-471. IF₂₀₁₃ = 2,507; Категорија: Chemistry, Medicinal 28/58 (M22), Biochemistry & Molecular Biology 173/291 (M22)

<https://doi.org/10.1111/cbdd.12261>

Бр. аутора 6

Бр. поена након нормирања према формули $K/(1+0,2(n-5)) = 4,167$

6. **Senćanski, M.**, Ivanović, M.D., Došen-Mićović, L., Modelling of ORL1 receptor-ligand interactions, *Chemical Papers*, 2014, 68(10), 1305-1316. IF₂₀₁₄ = 1,468; Категорија: Chemistry, Multidisciplinary 79/157 (M22)

<https://doi.org/10.2478/s11696-014-0577-z>

Бр. поена 5

II-M23 Рад у међународном часопису

1x3 = 3

1. **Senćanski, M.**, Došen-Mićović, L. In silico study of the structurally similar ORL1 receptor agonist and antagonist pairs reveal possible mechanism of receptor activation, *Protein Journal*, 2014, 33(3), 231-242. IF₂₀₁₂ = 1,126; Категорија: Biochemistry & Molecular Biology 250/290 (M23)

<https://doi.org/10.1007/s10930-014-9555-0>

Бр. поена 3

II-Часопис без импакт фактора

0

1. Veljkovic, V., Goeijenbier, M., Glisic, S., Veljkovic, N., Perovic, V.R., **Sencanski, M.**, Branch, D.R., Paessler, S. In silico analysis suggests repurposing of ibuprofen for prevention and treatment of EBOLA virus disease *F1000Research*, 2015, 4, art. no. 104.

<https://doi.org/10.12688/f1000research.6436.1>

II-M34 Саопштење са међународног скупа штампано у изводу

6 x 0,5 + 4x0,417 = 4,668

1. Milan Senćanski, Sonja Grubišić, DFT examination of Dispersive and Electrostatic Contributions to Selenium-Aromatic Interactions and Comparison With Sulfur, First MOLIM Training School: From Potentials to Dynamics The Starting Journey, University of Coimbra, Portugal, March 30-April 3 2016, Programme and Book of Abstracts p. 66, COST CM 1405.

Бр. поена 0,5

2. Milan Senćanski and Sonja Grubišić, Theoretical Study of the Nature of S- π Interactions, Their Role in Activation Process of Dopamine D2 receptor and Comparison with Se- π Systems, 2nd MOLIM General Meeting 10-12 October 2016 Dubrovnik, Croatia, Book of Abstracts p. 46

Бр. поена 0,5

3. Sanja Glisic, **Milan Sencanski**, Nevena Veljkovic, Milka Vrecl, Identification of nanobody derived peptides stabilizing functional conformational state of the beta2 adrenergic receptor (β 2ar) GLISTEN 2016 Spring conference, April 6th-8th, 2016, Erlangen, Book of Abstracts p. 24

Бр. поена 0,5

4. Sanja Glišić, **Milan Senćanski**, Nevena Veljković, Draginja Radošević, Vladimir Perović, Veljko Veljković, Combined in silico approaches for the selection of antileishmanial inhibitors, COST action CM1307, 2nd Conference Belgrade OCTOBER 26-28, 2015, Book of Abstracts p. 69

Бр. аутора 6

Бр. поена након нормирања према формули $K/(1+0,2(n-5)) = 0,417$

5. **Milan Senćanski**, Veljko Veljković, Draginja Radošević, Vladimir Perović, Nevena Veljković and Sanja Glišić, Combined in silico approaches for selection of novel Nociceptin receptor small molecule agents, GLISTEN Meeting Amsterdam 2015, 12-13 October 2015, Book of Abstracts p. 30

Бр. аутора 6

Бр. поена након нормирања према формули $K/(1+0,2(n-5)) = 0,417$

6. **Milan Senćanski**, Veljko Veljković, Draginja Radošević, Vladimir Perović, Nevena Veljković and Sanja Glišić, Combined in silico approaches for selection of novel Nociceptin receptor ligands, CM1103 Action conference in Belgrade 6-8 May 2015, "Computational Chemistry for Neurological Targets", Book of Abstracts, p.12

Бр. аутора 6

Бр. поена након нормирања према формули $K/(1+0,2(n-5)) = 0,417$

7. Nevena Veljković, **Milan Senćanski**, Marco Radi, Draginja Radošević, Vladimir Perović, Sanja Glišić, Combined in silico approaches for the selection of dual CCR5/CXCR4 inhibitors, GLISTEN Budapest 2014 Conference, Book of Abstracts, p. 30

Бр. аутора 6

Бр. поена након нормирања према формули $K/(1+0,2(n-5)) = 0,417$

8. Milan Senćanski, Vladimir Šukalović, Slađana Kostić-Rajačić, Molecular modelling of 5HT_{2A} receptor and key protein-ligand interactions, 8th International Conference of the Chemical Societies of the South-East European Countries, Book of Abstracts, p. 99

Бр. поена 0,5

9. Vukic V. Soškić, Vladimir Šukalović, Gordana Tovilović, **Milan Senćanski**, Deana Andrić, Slađana Kostić-Rajačić, Identification of key D2 receptor-ligand agonist/antagonist

interaction, 8th International Conference of the Chemical Societies of the South-East European Countries, 2013, Book of Abstracts, p. 110

Бр. поена 0,5

10. Milica Radibratović, **Milan Senćanski**, Vladimir Šukalović, Slađana Kostić-Rajačić, Ab initio calculations of aromatic protein-ligand interactions inside the binding site of dopamine D2 receptor. 8th International Conference of the Chemical Societies of the South-East European Countries, 2013, Book of Abstracts, p. 112

Бр. поена 0,5

II-M64 Саопштење са скупа националног значаја штампано у изводу

3 x 0,2 = 0,6

1. Božić, A. Marinković, **M. Senćanski**, N. Filipović, Sinteza, karakterizacija i pro-apoptotska aktivnost tiokarbohidrazona na matičnim ćelijama adenokarcinoma pankreasa (AsPC-1) III Konferencija mladih hemičara Srbije, 24. oktobar 2015, Beograd, Srbija, Izvodi radova str. 28.

Бр. поена 0,2

2. Vladimir Šukalović, **Milan Senćanski**, Vukić Šoškić, Slađana Kostić-Rajačić, Homologo modelovanje 5HT1A receptora, 51. SAVETOVANJE SRPSKOG HEMIJSKOG DRUŠTVA I 2. KONFERENCIJA MLADIH HEMIČARA SRBIJE, Niš, 5-7 juni 2014., Program i kratki izvodi radova, str. 97

Бр. поена 0,2

3. **Milan V. Senćanski**, Milovan D. Ivanović i Ljiljana Došen-Mićović, Modelovanje inaktivnih i aktivnih konformacija ORL1 receptora, 50. SAVETOVANJE SRPSKOG HEMIJSKOG DRUŠTVA, Beograd 14-15. JUNI 2012., Knjiga apstrakata, str. 99

Бр. поена 0,2

III - БИБЛИОГРАФСКИ ПОДАЦИ ПОСЛЕ ИЗБОРА У ЗВАЊЕ ВИШИ НАУЧНИ САРАДНИК

III-M14 Поглавље у књизи M12

1 x 4 = 4

1. **Sencanski M**, Glisic S, Direct-acting antiviral drugs for treatment of hepatitis C virus infection-clinical trials data and chemistry of NS3/4A protease inhibitors, *Frontiers in Clinical Drug Research - Anti Infectives*, 2020, 6, 1-48. Bentham Science Publisher, Print ISSN 2452-3208, Online ISSN 2352-3212

<https://doi.org/10.2174/9789811425745120060001>

III-M21a Рад у врхунском међународном часопису

1x10 = 10 (нормирано 5)

1. Mirna Jovanović, Daniil Zhukovsky, Ana Podolski-Renić, Iona Domračeva, Raivis Žalubovskis, **Milan Senćanski**, Sanja Glišić, Vladimir Sharoyko, Tatiana Tennikova, Dmitry Dar'in, Milica Pešić, Mikhail Krasavin, Novel electrophilic amides amenable by the Ugi reaction perturb thioredoxin system via thioredoxin reductase 1 (TrxR1) inhibition: Identification of DVD-445 as a new lead compound for anticancer therapy, *European Journal of Medicinal Chemistry* 2019, 181, 111580. IF₂₀₁₉ = 5,573; Категорија: Chemistry, Medicinal 5/61 (M21a)

<https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2019.111580>

Бр. аутора 12

Бр. поена након нормирања према формули $K/(1+0,2(n-7)) = 5$

III-M21 Рад у врхунском међународном часопису

12 x 8 = 96 (нормирано 76,285)

1. Marija D Stanišić, Nikolina Popović Kokar, Predrag Ristić, Ana Marija Balaž, **Milan Senćanski**, Miloš Ognjanović, Veljko R Đokić, Radivoje Prodanović, Tamara R Todorović, Chemical Modification of Glycoproteins' Carbohydrate Moiety as a General Strategy for the Synthesis of Efficient Biocatalysts by Biomimetic Mineralization: The Case of Glucose Oxidase, *Polymers*, 2021, 13(22), 3875. IF₂₀₂₁ = 4,967; Категорија: Polymer Science 16/90 (M21)

<https://doi.org/10.3390/polym13223875>

Бр. аутора 9

Бр. поена након нормирања према формули $8/(1+0,2x(9-7))=5,714$

2. Sanja Glisic, Vladimir R. Perovic, **Milan Sencanski**, Slobodan Paessler, Veljko Veljkovic, Biological Rationale for the Repurposing of BCG Vaccine against SARS-CoV-2, *Journal of Proteome Research*, 2020, 19, 11, 4649–4654. IF₂₀₂₀ = 4,466; Категорија: Biochemical research methods 17/78 (M21)

<https://doi.org/10.1021/acs.jproteome.0c00410>

Бр. поена 8

3. Isca VMS, **Sencanski M**, Filipovic N, Dos Santos DJVA, Čipak Gašparović A, Saraíva L, Afonso CAM, Rijo P, García-Sosa AT, Activity to Breast Cancer Cell Lines of Different Malignancy and Predicted Interaction with Protein Kinase C Isoforms of Royleanones *International Journal of Molecular Sciences*, 2020, 21(10), 3671. IF₂₀₂₀ = 5,924; Категорија: Biochemistry & Molecular Biology 67/296 (M21), Chemistry, multidisciplinary 49/178 (M21)

<https://doi.org/10.3390%2Fijms21103671>

Бр. аутора 9

Бр. поена након нормирања према формули $8/(1+0,2x(9-7))=5,714$

4. Bondžić AM, **Senćanski MV**, Vujačić Nikezić AV, Kirillova MV, André V, Kirillov AM, Bondžić BP, Aminoalcoholate-driven tetracopper(II) cores as dual acetyl and butyrylcholinesterase inhibitors: Experimental and theoretical elucidation of mechanism of action, *Journal of Inorganic Biochemistry*, 2020, 205, 110990. IF₂₀₂₀ = 4,155; Категорија: Chemistry, Inorganic & Nuclear 9/45 (M21)

<https://doi.org/10.1016/j.jinorgbio.2019.110990>

Бр. поена 8

5. Blagotinšek Cokan K, Mavri M, Rutland CS, Glišić S, **Senćanski M**, Vrecl M, Kubale V., Critical Impact of Different Conserved Endoplasmic Retention Motifs and Dopamine Receptor Interacting Proteins (DRIPs) on Intracellular Localization and Trafficking of the D2 Dopamine Receptor (D2-R) Isoforms, *Biomolecules*, 2020, 10(10), 135. IF₂₀₁₈ = 4,694; Категорија: Biochemistry & Molecular Biology 58/299 (M21).

<https://doi.org/10.3390/biom10101355>

Бр. аутора 7

Бр. поена након нормирања према формули $10/(1+0,2x(7-5))=7,143$

6. Nenad R. Filipović, Snežana K. Bjelogrić, Sveva Pelliccia, Vesna B. Jovanović, Milan Kojić, **Milan Senćanski**, Giuseppe La Regina, Romano Silvestri, Christian D. Muller, Tamara R. Todorović, Selenotriapine – An isostere of the most studied thiosemicarbazone with pronounced pro-apoptotic activity, low toxicity and ability to challenge phenotype reprogramming of 3-D mammary adenocarcinoma tumors, *Arabian Journal of Chemistry*, 2020, 13(1), 1466-1489. IF₂₀₁₉ = 4,762; Категорија: Chemistry, Multidisciplinary 45/177 (M21)

<https://doi.org/10.1016/j.arabjc.2017.11.017>

Бр. аутора 10

Бр. поена након нормирања према формули $8/(1+0,2x(10-7))=5$

7. **Milan Sencanski**, Sanja Glisic, Marko Šnajder, Nevena Veljkovic, Nataša Poklar Ulrih, Janez Mavri, Milka Vrecl, Computational design and characterization of nanobody-derived peptides that stabilize the active conformation of the β 2-adrenergic receptor (β 2-AR), *Scientific Reports*, 2019, 9, 16555. IF₂₀₁₇ = 4,122; Категорија: Multidisciplinary Sciences 12/64 (M21)

<https://doi.org/10.1038/s41598-019-52934-8>

Бр. поена 8

8. Snežana K Bjelogrić, Tamara R Todorović, Milan Kojić, **Milan Senćanski**, Milan Nikolić, Aleksandar Višnjevac, Jovana Araškov, Marija Miljković, Christian D Muller, Nenad R Filipović, Pd(II) complexes with N-heteroaromatic hydrazone ligands: Anticancer activity, in silico and experimental target identification, *Journal of Inorganic Biochemistry*, 2019, 199, 110758. IF₂₀₁₈ = 3,224; Категорија: Chemistry, Inorganic & Nuclear 11/45 (M21)

<https://doi.org/10.1016/j.jinorgbio.2019.110758>

Бр. аутора 10

Бр. поена након нормирања према формули $8/(1+0,2x(10-7))= 5$

9. Radosevic D, **Sencanski M**, Perovic V, Veljkovic N, Prljic J, Veljkovic V, Mantlo E, Bukreyeva N, Paessler S, Glisic S, Virtual Screen for Repurposing of Drugs for Candidate Influenza a M2 Ion-Channel Inhibitors, *Frontiers in Cellular and Infection Microbiology*, 2019, 9, 67. IF₂₀₁₉ = 4,123; Категорија: Microbiology 38/135 (M21)

<https://doi.org/10.3389/fcimb.2019.00067>

Бр. аутора 10

Бр. поена након нормирања према формули $8/(1+0,2x(10-7))= 5$

10. Maja Susec, **Milan Sencanski**, Sanja Glisic, Nevena Veljkovic, Christina Pedersen, Luka Drinovec, Jurij Stojan, Jane Nøhr, Milka Vrecl, Functional characterization of β 2-adrenergic and insulin receptor heteromers, *Neuropharmacology*, 2019, 152, 78-89. IF₂₀₁₉ = 4,431; Категорија: Neurosciences 68/272 (M21), Pharmacology and Pharmacy 43/271 (M21)

<https://doi.org/10.1016/j.neuropharm.2019.01.025>

Бр. аутора 9

Бр. поена након нормирања према формули $8/(1+0,2x(9-7))=5,714$

11. Stevanović Strahinja, Andrej Perdih, **Milan Senćanski**, Sanja Glišić, Margarida Duarte, Ana M. Tomás, Filipa V. Sena, Filipe M. Sousa, Manuela M. Pereira, Tom Solmajer, In Silico Discovery of a Substituted 6-Methoxy-quinalidine with Leishmanicidal Activity in Leishmania infantum, *Molecules*, 2018, 23(4), 772. IF₂₀₁₆ = 2,861; Категорија: Chemistry, Organic 17/59 (M21)

<https://doi.org/10.3390/molecules23040772>

Бр. аутора 10

Бр. поена након нормирања према формули $8/(1+0,2x(10-7))= 5$

12. Bojić, T., Perović, V. R., **Senćanski, M.**, & Glišić, S. Identification of candidate allosteric modulators of the m1 muscarinic acetylcholine receptor which may improve vagus nerve stimulation in chronic tinnitus, *Frontiers in Neuroscience*, 2017, 11, 636. IF₂₀₁₇ = 3,877; Категорија: Neurosciences 77/261 (M21)

<https://doi.org/10.3389/fnins.2017.00636>

Бр. поена 8

1. **Milan Sencanski**, Vladimir Perovic, Jelena Milicevic, Tamara Todorovic, Radivoje Prodanovic, Veljko Veljkovic, Slobodan Paessler, Sanja Glisic, Identification of SARS-CoV-2 Papain-like Protease (PLpro) Inhibitors Using Combined Computational Approach, *ChemistryOpen*, 2022, 11(2), e202100248. IF₂₀₂₀ = 2,911; Категорија: Chemistry, Multidisciplinary 94/178 (M22)

<https://doi.org/10.1002/open.202100248>

Бр. аутора 8

Бр. поена након нормирања према формули $5/(1+0,2x(8-5))=3,125$

2. Tijana Bojić, **Milan Sencanski**, Vladimir Perovic, Jelena Milicevic, Sanja Glisic, In Silico Screening of Natural Compounds for Candidates 5HT6 Receptor Antagonists against Alzheimer's Disease, *Molecules*, 2022, 27(9), 2626. IF₂₀₂₁ = 4,927; Категорија: Chemistry, Multidisciplinary 65/180 (M22), Biochemistry & Molecular Biology 114/297 (M22)

<https://doi.org/10.3390/molecules27092626>

Бр. поена 5

3. **Milan Sencanski**, Vladimir Perovic, Snezana B. Pajovic, Miroslav Adzic, Slobodan Paessler, Sanja Glisic, Drug Repurposing for Candidate SARS-CoV-2 Main Protease Inhibitors by a Novel In Silico Method, *Molecules*, 2020, 25(17), 3830. IF₂₀₂₀ = 4,412; Категорија: Chemistry, Multidisciplinary 63/178 (M22), Biochemistry & Molecular Biology 115/296 (M22)

<https://doi.org/10.3390/molecules25173830>

Бр. аутора 6

Бр. поена након нормирања према формули $5/(1+0,2x(6-5))=4,167$

4. Stanislava Matejin, Natalya Bukreyeva, Draginja Radosevic, **Milan Sencanski**, Emily Mantlo, Veljko Veljkovic, Sanja Glisic, Slobodan Paessler, In vitro anti-influenza activity of in silico repurposed candidate drug Cycrimine, *Antiviral Therapy*, 2019, 24(8), 589-593. IF₂₀₁₈ = 2,305; Категорија: Pharmacology and Pharmacy 156/267 (M22)

<https://doi.org/10.3851/imp3348>

Бр. аутора 8

Бр. поена након нормирања према формули $5/(1+0,2x(8-7))=4,167$

5. Strahinja Stevanovic, **Milan Sencanski**, Mathieu Danel, Christophe Menendez, Roumaissa Belguedj, Abdelmalek Bouraiou, Katarina Nikolic, Sandrine Cojean, Philippe M Loiseau, Sanja Glisic, Michel Baltas, Alfonso T García-Sosa, Synthesis, In Silico, and In Vitro Evaluation of Anti-Leishmanial Activity of Oxadiazoles and Indolizine Containing Compounds Flagged against Anti-Targets, *Molecules*, 2019, 24(7), 1282. IF₂₀₁₉ = 3,267; Категорија: Chemistry, Multidisciplinary 70/177 (M22), Biochemistry & Molecular Biology 142/297 (M22)

<https://doi.org/10.3390/molecules24071282>

Бр. аутора 12

Бр. поена након нормирања према формули $5/(1+0,2x(12-7))=2,5$

6. Slobodan Paessler, Cheng Huang, **Milan Sencanski**, Nevena Veljkovic, Vladimir Perovic, Sanja Glisic, Veljko Veljkovic, Ibuprofen as a template molecule for drug design against Ebola virus, *Frontiers in Bioscience (Landmark edition)*, 2018, 23(5), 947-953. IF₂₀₁₆ = 2,497; Категорија: Biochemistry & Molecular Biology 162/290 (M22)

<https://doi.org/10.2741/4627>

Бр. поена 5

III-M34 Саопштење са међународног скупа штампано у изводу

6 x 0,5 = 3,0 (нормирано 2,917)

1. **Milan Sencanski**, Jelena Milicevic, Vladimir Perovic and Sanja Glisic, Repurposing of antiparasitic drugs for Candidate SARS-CoV-2 Main Protease Inhibitors by combined in silico Method, Belgrade BioInformatics Conference 2021, 21-25 June 2021, Vinča, Serbia, Book of Abstracts, p. 111

Бр. поена 0,5

2. **Milan Senčanski**, Radivoje Prodanović, Predrag Ristić, Ana Marija Balaž, Marija Stanišić, Tamara Todorović, Modelling of catalytic activity and enzyme-MOF interactions using combined in silico approach, 22nd ANNUAL CONFERENCE YUCOMAT 2021, Herceg Novi, August 30 – September 3, 2021, Book of Abstracts, p. 124

Бр. аутора 6

Бр. поена након нормирања према формули $0,5/(1+0,2x(6-5))=0,417$

3. **Milan Senčanski**, Jelena Milićević and Sanja Glišić, Combined in silico approaches for design and selection of new receptor ligands, ADHESion GPCR Network: Research and Implementation Set the path for future Exploration, First General Meeting, ADHER'N RISE COST ACTION CA18240, March 4-6 2020, Leipzig, Germany, Book of Abstracts, p. 25

Бр. поена 0,5

4. **Milan Sencanski**, Milka Vrecl and Sanja Glisic, Identification of nanobody derived peptides stabilizing active conformations of opioid receptors, COST Action CA18333, ERNEST, European Research Network on Signal Transduction, The Inaugural Meeting of the European Research Network in Signal Transduction, GPCR Pharmacology: Activation, signaling and Drug Design, October 28-30, 2019, Queen's University Belfast, Belfast, Northern Ireland, UK, Book of Abstracts p. 82

Бр. поена 0,5

5. Lj. Gavrilović, **M. Senčanski**, D. Radošević, S. Glišić, In silico screening for GSK-3β inhibitors as potential radioprotectors, International conference on radiation applications (RAP 2019), Belgrade, 16. - 19. Sep, 2019, Book of Abstracts pp. 133.

Бр. поена 0,5

6. Војић, Т., Perović, V, **Senčanski, M**, Glišić, S., Common molecular mechanism of the hepatic lesion and the cardiac parasympathetic regulation in chronic hepatitis C infection: a critical role for the muscarinic receptor type 3, 12th Anniversary of Protein & Peptide Conference, Beijing, China, 14. - 16. Jun, 2019, Book of Abstracts

Бр. поена 0,5

III АНАЛИЗА РАДОВА ПОСЛЕ ИЗБОРА У ЗВАЊЕ ВИШИ НАУЧНИ САРАДНИК

III-M14-1

Овај рад представља поглавље у књизи „Frontiers in Clinical Drug Research - Anti Infectives“. Аутори су дали преглед антивирусних лекова директног деловања (direct-acting antivirals, DAA) у третману хепатитиса типа Ц (HCV вируса). DAA циљају специфичне неструктурне протеине вируса HCV-а, важне у процесу репликације вируса. Инхибитори NS3/4a протеазе су постали основа за лечење HCV-а јер већина нових терапија садржи инхибиторе из ове класе. Аутори су извршили преглед литературе да би се пронашли резултати објављених клиничких испитивања у вези са комбинованом терапијом DAA инхибиторима NS3/4a протеазе треће генерације. Детаљна пажња посвећена је хемији одобрених NS3/4a лекова и кандидата за терапију

у вишим фазама развоја. Представљен је преглед кључних фаза дизајна лекова и синтезе за анти-NS3/4a DAA.

III-M21a-1

У овом раду је приказана серија пептидомиметика која садрже електрофилни део структуре, синтетизована коришћењем Угијеве реакције. Ова једињења су дизајнирана да циљају селеноцистеински каталитички остатак Тиоредоксин редуктазе 1 (TrkR1), обећавајућу мету рака. Потенцијал инхибиције TrkR1 ових једињења је извршен коришћењем лизата ћелија хуманог неуробластома. На основу овог почетног скрининга, шест једињења је одабрано за тестирање против рекомбинантног TrkR пацова. Процењено је да једињења испољавају антипролиферативну активност и индукују ћелијску смрт. Ова класа једињења се представила као богат извор кандидата за инхибиторе TrkR у примени против рака. Једињење 7 (DVD-445) је номиновано као водећи за даљу оптимизацију. Рад садржи и рачунарску анализу везивања једињења за активно место TrkR1, методом ковалентног молекулског докинга.

III-M21-1

У овој публикацији је представљена оптимизација макромолекулских интеракција са циљем побољшања активности енкапсулираног ензима унутар MOF (Metal-organic Framework). Наиме, зеолитски имидазолатни оквир-8 (ZIF-8) се користи за капсулирање протеина путем биомиметичке минерализације. Формирање центара нуклеације и даљи раст кристала биокомпозита зависи од електростатичких интеракција између површине протеина и позитивно наелектрисаних јона метала Zn(II). Показано је да побољшање ових електростатичких интеракција хемијском модификацијом површинских аминокиселинских остатака може довести до брзог формирања кристала биокомпозита. Међутим, хемијска модификација компоненти угљених хидрата перјодатном оксидацијом гликопротеина може послужити као алтернативна стратегија. У овој студији, индустријски важан ензим глукоза оксидаза (GOx) је одабран као модел систем. Експерименти биоминерализације са оксидованим GOx резултирали су већом специфичном активношћу, фактором ефикасности и већом термостабилношћу ZIF-8 биокомпозита. Значај резултата овог рада се огледа у томе да перјодатна оксидација компоненти угљених хидрата за гликопротеине може послужити као лака и општа метода за олакшавање биомиметичке минерализације код других индустријски важних протеина.

III-M21-2

У овом раду се аутори баве пренаменом вакцине BCG као превентиве против теже клиничке слике оболелих од COVID-19. BCG се још увек широко користи у земљама у развоју и спречава смрт новорођенчади не само од туберкулозе, већ и од других инфективних агенаса, посебно инфекција респираторног тракта и неонаталне сепсе. Сматра се да су ови заштитни ефекти BCG вакцине ван основне примене условљени општим дугорочним јачањем урођених имуних механизма, који се такође називају „урођени имунитет“. Студије показују да су и инциденција од COVID-19 и укупни број смртних случајева повезани са присуством или одсуством националних обавезних програма вакцинације BCG-ом и подстакле покретање неколико клиничких студија са очекивањем да би ревакцинација BCG-ом могла да смањи инциденцу и тежину COVID-19 клиничке слике. Аутори су представили биоинформатичку анализу протеома *Micobacterium bovis* (сој BCG/Paster 1173P2) који сугеришу четири имунодоминантна антигена који би могли да изазову имуни одговор против SARS-CoV-2.

III-M21-3

У овом раду се аутори баве природним производима биљака, рода *Plectranthus*, који има велики избор врста које садрже једињења значајних цитотоксичних активности. Неколико једињења класе абиетана - 6,7 - дехидроилеанон (DeRoy), 7 α -ацетокси-6 β -

хидроксироилеанон (Roу) и Парвифлорон Д (ParvD) добијени су од *Plectranthus* spp. и показали цитотоксичност. Инхибицијски ефекти различитих природних абиетана су измерени на ћелијским линијама MFC7, SkBr3 и SUM159. На основу биоактивности ројлеанона, деривати RoiBz, Roi BzCl, RoiPr2 и DihydroxyRoу, претходно синтетисани из Roу, су одабрани за даља истраживања. Протеин киназе Ц (PKC) су укључене у неколико процеса карциногенезе, па су стога потенцијалне мете у терапији канцера. Фине разлике у везивном месту сваке PKC изоформе захтевају различите интеракционе профиле са лигандима. Баш зато, fine разлике у структурама пријављених ројлеанона, могу условити јаче протеин-лиганд интеракције код одређених PKC подтипова. Молекулски докинг је коришћен за процену ових ројлеанона као изоформски селективних PKC инхибитора.

III-M21-4

У овом раду су испитивана три MOF координациона једињења која садрже различите типове тетрабакар(II) језгара и њихова моћ да инхибирају ензиме ацетил и бутилхолинестеразе. Циљ истраживања је био да се ова једињења тестирају као потенцијални двоструки инхибитори у лечењу Алцхајмерове болести. Сва испитивана једињења су показала јаку инхибиторну моћ према оба ензима са вредностима IC50 у микромоларном опсегу концентрација. Прво једињење је показало најјачи инхибиторно ефекат на оба ензима. Испитиван је и механизам инхибиције методама ензимске кинетике. Резултати мерења показују некомпетитивну врсту инхибиције оба ензима једињењем. За друга два једињења примећен је неконкурентни начин инхибиције. Да би се предвидела везивна места на ензиму, примећен је молекулски докинг. Резултати су показали да се једињења могу везати за периферно алостерно место, различито од примарног.

Допринос овог рада је да ова једињења заснована на Cu(II) могу деловати као нови алостерни инхибитори ацетилхолин естеразе, као и идентификација новог алостерног везивног места на ензиму.

III-M21-5

У овој публикацији, аутори се баве Допаминским рецептором D2 и његове две изоформе, кратком (D2S-R) и дугом (D2L-R). Разликују се по додатних 29 аминокиселина (AA) у трећој цитоплазматској петљи (ICL3) D2LR. Ове изоформе се разликују по својој интраћелијској локализацији и функционалности. Овај рад је ревијалног типа и фокусира се на еволутивно очуване мотиве у ICL3 D2R и протеине који су у интеракцији са ICL3 обе изоформе. Такође су представљени недавни биоинформатички подаци аутора о потенцијалним новим партнерима у интеракцији за ICL3 D2R. Оба облика веома значајна и имају клинички утицај на патофизиологију неколико болести као што су Паркинсонова болест, шизофренија, Туретов синдром, Хантингтонова болест, манична депресија и друге.

III-M21-6

У овој публикацији, аутори пријављују студију хемијски модификованог триапина, као могући антиканцерогени агенс. Да би се побољшала антиканцерогена активност, извршена је изостерна замена сумпора атом селена, која је изведена синтезом и карактеризацијом селенског аналога триапина, 3-аминопиридин-2-карбоксалдехид селеносемикарбазона (селенотриапина). У поређењу са триапином, селенотриапин је показао супериорну про-апоптотичку активност са активацијом унутрашњег апоптотичког пута у ћелијским линијама хумане моноцитне леукемије (THP-1) и аденокарцинома дојке (MCF-7). Поред тога, селенотриапин је показао веома низак профил токсичности у поређењу са триапином. Резултати су поткрепљени одговарајућим рачунарским моделовањем.

III-M21-7

Ова студија је имала за циљ да дизајнира и функционално карактерише пептидомиметике изведене из нанотела (Nanobody derived peptides, NDP) који се везују за β_2 адренергички рецептор (β_2 -АР). Биоинформатички дизајнирани пептиди, изведен из нанотела Nb71, је скраћен и оптимизован у домену CDR3, чиме је доказано да је тај регион довољан за интеракцију са рецептором. Пептиди су дизајнирани коришћењем ISM методе, а затим су доковани у простор интрацелуларне петље рецептора и даље оптимизовани методама молекулске динамике. Коначно, слободна енергија везивања је израчуната методом метадинимике. Одабрани пептид NDP Nb71, означен као P3, је дугачак 17 аминокиселина и укључује CDR3. Метадинамичким прорачунима је слободну енергију везивања показала добро слагање са експерименталним мерењима.

III-M21-8

У овом раду је показана антиканцерогена активност Pd(II) комплекса 1–5 са бидентатним N-хетероароматичним хидразонским лигандима. Активност је испитивана на ћелијама хумане акутне моноцитне леукемије и аденокарциному дојке (MCF-7 ћелијске линије). *In silico* студија молекулским докингом је потврдила експерименталне резултате да Pd(II) комплекси инхибирају топоизомеразе I и II у микромоларном опсегу, указујући и на везивање за мању бразду ДНК као другу потенцијалну мету.

III-M21-9

У овој публикацији се ради о пренамени лекова као блокатора M2 протеина вируса инфлуенце А. M2 протеин је јонски канал, кључан за инфицирање вирусом и стога је важна мета за лек против грипа. Адамантани, такође познати као блокатори M2 канала, су једна од две класе лекова против грипа које је одобрила FDA, међутим, њихова употреба је обустављена због резистенције вируса. У овом раду је приказан теоретски критеријум за брз виртуелни скрининг библиотека молекула као кандидата за инхибиторе јонских канала вируса грипа, како за дивљи тип тако и за вирусе отпорне на адамантане. Након *in silico* скрининга лекова коришћењем EIP/AQVN филтера и даљег филтрирања лекова методама заснованих на структури молекула и молекулским докингом, предложени су најбољи кандидате за лекове као двоструки инхибиторе дивљег типа и вируса грипа А отпорног на адамантане. Експериментално је тестиран гванетидин, најбоље ранжирани лек изабран из виртуелног скрининга заснованог на структури лиганда. Експериментални резултати су показали мерљиву антивиралну активност гванетидина у ћелијској култури.

III-M21-10

У овој студији се аутори баве функционалном карактеризацијом хетеродимера β_2 -адренергичког (β_2 АР) и инсулинског рецептора (IR) у погледу везивања β -арестина 2 (β arr2) и сАМР сигнализације, и испита учешће цитоплазматског дела IR β ланца у хетеромеризацији са β_2 АР. Формирање комплекса β_2 АР:IR: β arr2 и специфичност интеракције IR: β arr2 је прво предиковано биоинформатичком анализом. Технологија испитивања рецептора-хетеромера је пружила функционалне доказе о β_2 АР:IR хетеродимеризацији. Докази који сугеришу интеракцију цитоплазматског дела IR β ланца са β_2 АР су добијени BRET 2 и HIT тестовима. Комплементарна 3D визуализација β_2 АР:IR, методом молекулске динамике је пружила доказ о стабилности комплекса хетеротетрамера и идентификоване аминокиселинске остатке укључене у β_2 АР:IR хетеромеризацију.

III-M21-11

У овој публикацији се ради о проналажењу агенаса – инхибитора раста Лајшманије. Као погодна мета у овом процесу је одабрана NADH дехидрогеназа типа 2 из *Leishmania infantum* (LiNDH2). На основу доступних података из кристалографских структура је конструисан тродимензионални структурни модел LiNDH2, користећи

хомолого моделовање. Затим је извршена *in silico* виртуелна претрага потенцијалних инхибитора који циљају LiNDH2 место на које се везује убихинон. Одабраним једињењима из скрининга је затим испитана инхибиторна активност у структурно сличној NDH-2 из *S. aureus*, а лајшманицидна активност је одређена код дивљег типа аксенских амастигота и промастигота *L. infantum*. Идентификовано једињење, супституисани 6-метокси-квиналидин, показало је обећавајућу наномоларну лајшманицидну активност на дивље аксенске промастиготе и амастиготе *L. infantum* и потенцијал у даљем развоју агенса.

III-M21-12

У овом раду, аутори се баве пренаменом лекова у борби против хроничног тинитуса. Обећавајући метод за терапију хроничног тинитуса је стимулација вагусног нерва (ВНС) у комбинацији са слушном стимулацијом. Механизам деловања ВНС код пацијената са хроничним тинитусом је претежно кроз мускаринску неуромодулацију. Циљ ове студије је био да предложи потенцијалне фармацеутске лекове који могу побољшати неуромодулаторне ефекте ВНС. Хипотеза је да М1 рецептори имају доминантну улогу у неуралној пластичности слушног кортекса. Као терапију, аутори предлажу алостеричне агонисте рецептора мускаринског рецептора типа 1 (М1), који могу побољшати специфичност и селективност неуромодулаторног ефекта ВНС на слушни кортекс пацијената са хроничним тинитусом. Извршена је *in silico* претрага доступних лекова користећи ЕИП/АQVN филтер и одабрано је 50 лекова као кандидата алостерних модулатора мускаринских рецептора. Даљим филтрирањем ових једињења помоћу 3D QSAR и молекулског докинга, предложена су 3 одобрена лека — бромазепам, естазолам и флумазенил као најперспективнији кандидати за комбиноване терапију хроничног тинитуса.

III-M22-1

У овој публикацији, аутори су извршили рачунарску пренамену лекова који инхибирају Папаин налик протеазу (PLpro) вируса SARS-CoV-2. SARS-CoV-2 PLpro је важан у репликацији вируса и утиче на имуни систем домаћина тако што инхибир урођени имуни одговор домаћина, и стога је привлачна мета за лекове. Коришћењем биоинформатичке методе ISM-SM, база података Drugbank је претражена, након чега је уследио молекулски докинг. Коначно су идентификована 44 кандидата. Овај рад је иначе логичан наставак публикације III-M22-4.

III-M22-2

У овом раду, аутори су извршили селекцију природних једињења из базе ZINC као потенцијалних кандидата 5HT6 рецептора. Алцхајмерова болест, као неуродегенеративна болест, је у фокусу фармаколошких истраживања. Једна од мета које привлаче највећу пажњу за потенцијалну терапију је 5HT6 серотонински рецептора. Сматра се да овај рецептор игра важну улогу у когнитивним системима, системима учења и памћења, који су од критичне важности за третман Алцхајмерове болести. База података ZINC природних производа је *in silico* претражена да би се пронашли кандидати антагонисти 5HT6 рецептора. Коришћен је протокол виртуелни скрининга који укључује интеракције кратког и дугог домета између протеина и малог молекула. Прво је примењен ЕИП/АQVN филтер примењен, а затим је уследио 3D QSAR и молекулски докинг. Десет најбољих кандидата је одабрано као потенцијалних антагониста 5HT6 рецептора и предложено за даљу евалуацију. Најбољи кандидат је подвргнут молекулско динамичким симулацијама и рачунима слободне енергије.

III-M22-3

У овом раду, применом нове методе далекосежних интеракција протеин-мали молекул, *in silico* пренаменом лекова су предложени кандидати из Drugbank базе за третман оболелих од SARS-CoV-2 вируса. Главна протеаза SARS-CoV-2, од суштинског значаја за репликацију вируса је атрактивна мета лека. У овој студији је коришћен виртуелни

скрининг интеракцијама дугог и кратког домета да би се одабрали кандидати за главне инхибиторе протеазе SARS-CoV-2. За претраживање базе података Drugbank је најпре коришћена метода информационог спектра примењена за мале молекуле (ISM-SM), а затим је уследио молекулски докинг. Коначно је идентификовано 57 лекова као потенцијалних инхибитора SARS-CoV-2 главне протеазе. Овај рад је први рад објављен у Србији из ове тематике и први пут је коришћена ISM-SM метода. Сам рад је до сада цитиран 40 пута, без аутоцитата свих аутора.

III-M22-4

Овај рад представља наставак студије **III-M21-9** инхибитора M2 канала вируса инфлуенце, и у њему су пријављени експериментални подаци везани за лек цикримин.

III-M22-5

У овој публикацији, аутори предлажу нова једињења - инхибиторе раста лајшманије. Због недостатка одобрених вакцина против хумане лајшманијазе и ограничења тренутне хемотерапије која изазива нежељене ефекте и резистенцију на лекове, развој нових, ефикасних хемотерапеутских агенаса је од суштинског значаја. Ова студија описује синтезу серије нових оксадиазола и једињења која садрже индолизин. Једињења су прво одабрана *in silico* коришћењем EIP/AQVN филтера, а затим прослеђена на даљи скрининг методама заснованим на структури лиганда и молекулским докингом у ензим аргиназу. Најбољи кандидати су потом доковани у хуману аргиназу и на крају на батерију ензима да би се означиле њихове могуће интеракције са протеинима који учествују у метаболизму. Одабрано је осам једињења кандидата за даља експериментална испитивања. Резултати су показали мерљиву *in vitro* анти-лајшманијалну активност за три једињења, а једно једињење је одабрано за даљи развој нових агенаса против лајшманије.

III-M22-6

У овом раду, аутори се баве пренаменом лекова за борбу против вируса Еболе. Избијање вируса еболе у западној Африци 2015. и Конгу 2017. је указало на хитну потребу за развојем лекова против овог важног патогена. Пренаменом 6438 лекова из базе Drugbank, ибупрофен је изабран као могући инхибитор инфекције вирусом Еболе. Резултати молекулског докинга, као и експериментални резултати који показују мерљив антивирусни ефекат ибупрофена у ћелијској култури сугеришу да је ибупрофен обећавајући шаблон за развој лекова за лечење инфекције вирусом Еболе.

Пет најзначајнијих научних остварења кандидата од избора у претходно звање

Пет најзначајнијих научних остварења аутора су следеће публикације: III-M21-7, III-M21-9, III-M22-3, III-M22-5 и III-M21a-1. Кандидат је у овим публикацијама одиграо кључну улогу у рачунарском моделовању система, тумачењу добијених резултата и корелацији са експериментима. Допринос аутора је у коришћењу напредних метода молекулске динамике (метадинамике) у раду III-M21-7, а у радовима III-M21-9, III-M22-3 и III-M22-5 допринос се огледа у формирању филтера помоћу метода далекосежних и краткосежних међумолекулских интеракција које омогућава брзо и поуздано добијање кандидата за дате рецепторе. У публикацији III-M22-3 је први пут искоришћена нова метода далекосежних интеракција ISM-SM, а сам рад је до сада цитиран 40 пута, без аутоцитата свих аутора. У раду III-M21a-1, допринос аутора се огледа у томе што је извршен ковалентни докинг, метода захтевнија од класичног молекулског докинга, и то у рецепторску структуру која у датом тренутку није поседовала кокриселизованог лиганд. Опет, резултати рачунарског моделовања су се добро уклопили са експерименталним мерењима.

IV КВАЛИТАТИВНИ ПОКАЗАТЕЉИ УСПЕХА

Према елементима за квалитативну оцену научног доприноса кандидата, Комисија констатује да је др Милан Сенћански у свом досадашњем научноистраживачком раду постигао значајан допринос у следећим сегментима:

1. Показатељи успеха у научном раду

1.1. Рецензије научних радова

Др Милан Сенћански је рецензирао преко 40 научних радова за следеће часописе (импакт фактори за 2021 годину):

1. Arabian Journal of Chemistry (6,212)
2. Molecules (4,927)
3. Viruses (5,818)
4. Pharmaceuticals (5,215)
5. Biomolecules (6,064)
6. International Journal of Molecular Sciences (6,208)
7. Computers in Biology and Medicine (6,698)
8. Frontiers in Endocrinology (6,055)
9. Frontiers in Chemistry (5,545)
10. Journal of Serbian Chemical Society (1,100)
11. Journal of Theoretical and Computational Chemistry (2,440)
12. Molecular Simulation (2,346)

1.2. Чланства у одборима за организацију скупова

Кандидат је био члан International Program Committee и Local Organizing Committee of the 3rd Belgrade BioInformatics Conference – BelBI2021 (https://belbi.bg.ac.rs/wp-content/uploads/2021/06/Book_of_Abstracts_2021-1.pdf , стр 9-10)

Кандидат је био у организационом одбору Тренинг школе COST Training School “Bioinformatics approaches in adhesion GPCR research”, September 7-9, 2022., Institute of Molecular Genetics and Genetic Engineering, University of Belgrade, Serbia, у оквиру акције CA18240. (<https://www.adhernrise.eu/event-details/training-school-bioinformatics-approaches-in-adhesion-gpcr-research.html>)

Кандидат је био у организационом одбору COST CM1307 скупа - “Targeted chemotherapy towards diseases caused by endoparasites“, одржаног од 26-28 октобра 2015 у Београду (http://www.vin.bg.ac.rs/180/cost_cm1307/CM1307_Belgrade_oct_2015_book_of_abstracts.pdf)

Кандидат је био у организационом одбору COST BM1405 скупа “Non-globular proteins - from sequence to structure, function and application in molecular physiopathology (NGP-NET)“ одржаног од 14-18 септембра 2016 (http://www.vin.bg.ac.rs/180/cost_bm1405/committees.php).

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

2.1. Допринос развоју науке у земљи (учествовање на пројектима)

Милан Сенђански је ангажован од 2009. године на следећим пројектима Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије, као и Фонда за науку:

1. 2020-2022 COVIDTARGET - Пренамена лекова за превенцију и лечење COVID-19 је финансиран у оквиру Специјалног програма истраживања COVID – 19 Фонда за науку Републике Србије, бр. 7551100, www.covidtarget.rs
2. 2020-2022 SYMBIOSIS – КОНТРОЛИСАН ДИЗАЈН ЕФИКАСНИХ ENZYME@MOF КОМПОЗИТА ЗА БИОКАТАЛИЗУ, финансиран од стране Фонда за науку Републике Србије кроз програм ПРОМИС – Програм за извршне пројекте младих истраживача, бр. 6066997, www.symbiosispromis.org
3. 2015 - 2020 173001 „Примена ЕИР/ISM биотрансформатичке платформе у откривању нових терапеутских таргета и потенцијалних терапеутских молекула“ (од 2020. се наставља као пројектна тема)
4. 2011 – 2015 172035 “Рационални дизајн и синтеза биолошки активних и координационих једињења и функционалних материјала, релевантних у (био)нанотехнологији” и 172032 „Проучавање односа структуре и активности новосинтетисаних биолошки активних супстанци“
5. 2009 – 2010 14207 „Нови синтетички приступи, молекулско моделовање и фармаколошко испитивање хетероцикличних система са азотом“
6. 2009 143016 „Биофизичка истраживања мембранских процеса: интеракција мембранских рецептора и канала са спољашњим факторима и интрацелуларна регулација“

Др Милан Сенђански се на почетку каријере бавио квантном хемијом - теоријском молекулском спектроскопијом (радови I-M21a-1, I-M23-1,2,3, I-M34-1), али се после одбране доктората највише бавио рачунарским симулацијама биохемијских система – моделовањем протеин-лиганд интеракција, најчешће лек-рецептор у смислу рачунарског дизајна и пренаменом лекова код хроничних и инфективних болести. Одговарајући рецептори којима се др Милан Сенђански бавио код хроничних болести су следећи: ГПЦР рецептори - Алфа 1А (рад II-M21-9), 5HT1A (II-M64-2), 5HT2A (II-M22-5, II-M34-8), 5HT6 (III-M22-2), Допамински D2 (II-M21-8, III-M21-5, II-M34-9,10), Мускарински M1 рецептор (III-M21-12), опиоидни рецептори Ми (I-23-4, II-M22-3, I-M64-1, III-M34-4), Делта (I-M23-4), Капа (II-M22-3), ORL1 (II-M23-1, II-M22-6, II-M34-5,6), Бета адренергички-2 рецептор (III-M21-7, III-M21-10, II-M34-3) и ензим Ацетилхолинестераза (III-M21-4). Затим, што се тиче инфективних болести, у борби против лажшманије - ензими Аргиназа и NDH2 (II-M21-4, III-M21-11, III-M22-5, II-M34-4). Што се тиче вирусних болести, кандидат се бавио развојем лекова против инфлуенце – инхибиторима јонског канала M2(III-M21-9, III-M22-4), ковида 19 - SARS-CoV-2 Главне протеазе (III-M22-3, III-M34-1) и Папаин-налик протеазе (III-M22-1), механизмима споредних процеса код HCV инфекције (II-M21-2, III-M34-6), и код Еболе – агенсима спречавања фузије вирусних протеина и мембранских рецептора (II-M21-6, II-рад без ИФ, III-M22-6). Такође, предмет интересовања кандидата су и различите класе једињења која блокирају различите ензиме у развоју ћелија рака (II-M21-3, II-M21-7, II-M22-2, III-M21a-1, III-M21-3, III-M21-8, III-M21-6, III-M34-5), а поред тога и хемија биоматеријала у смислу симулирања ензим - MOF интеракција у оквиру рада на ПРОМИС Symbiosis пројекту Фонда за науку Републике Србије (III-M34-2). Такође, бавио се и квантнохемијским испитивањем нековалентних интеракција супституисаних ароматичних остатака и сумпора/селена (S-п и Se-п, радови II-M22-1, II-M22-4), и молекулско динамичким симулацијама појава на граничним слојевима фаза (II-M21-1).

Коаутор је и једног поглавља у књизи о HCV инхибиторима (III-M14-1) и ревијалног рада о природним једињењима - инхибиторима вируса инфлуенце (II-M21-5).

Методе рачунарског дизајна или пренамене лекова подразумевају у првом кораку предикцију међумолекулског препознавања путем метода далекосежних интеракција. Метода Информационог Спектра (Informational Spectrum Method, ISM), развијена 1985. године у Институту за Нуклеарне науке „Винча” успешно третира далекосежне протеин-протеин интеракције. Др Милан Сенћански је ову методу проширио на интеракцију малих молекула са протеинима (Informational Spectrum Method for Small Molecules). Ова метода је успешно допунила претходно развијене димензионалне дескрипторе ЕИР/АQVN за предикцију далекосежних интеракција протеин-мали молекула и успешно је примењена у случају пренамене лекова против COVID-19. Резултати овог истраживања су објављени у раду III-M22-3 који је до сада цитиран 40 пута. Поред тога, кандидат се успешно бавио QSAR-ом, молекулским докингом, молекулском динамиком и напредним методама молекулске динамике - рачунањима слободне енергије везивања протеин-лиганд. Сви прорачуни су рађени модерним *state-of-art* методама, користећи и комерцијални и некомерцијални софтвер. Хардверски захтевне симулације молекулске динамике су рађене коришћењем CUDA технологије на рачунарским кластерима у Институту за нуклеарне науке „Винча”, Националном институту за хемију у Љубљани или радним станицама добијених из средстава пројеката МПНТР или Фонда за науку. Поред тога, кандидат се бавио и биоинформатичким дизајном пептида изведених из протеина и предвиђањем промене ензимске активности увођењем тачкастих мутација, користећи софтвер написан у Лабораторији за биоинформатику и рачунарску хемију у Институту за нуклеарне науке „Винча”. Кандидат је свим рачунарским методама успешно овладао, и показао изузетну снажљивост у различитим гранама рачунарске хемије.

2.2. Менторство при изради завршних, мастер, магистарских и докторских радова

Др Милан Сенћански је био коментор једне докторске дисертације:

Страхиња Стевановић - „*In silico* селекција и *in vitro* испитивања природних и синтетских инхибитора раста паразита *Leishmania* spp.“, Фармацеутски факултет, Универзитет у Београду, 2022, (<https://147.91.1.130/handle/123456789/4609>)

Поред тога је био и члан комисија за одбрану још две докторске дисертације:

Милица Радан - „Одређивање структуре фармакофоре, дизајн и *in vitro* испитивање лиганата са вишеструким дејством као потенцијално ефикаснијих терапеутика сложених неуролошких и менталних обољења”, Фармацеутски факултет, Универзитет у Београду, 2022, <https://147.91.1.130/handle/123456789/4976>

Драгиња Радошевић - „*In silico* одабир лекова из базе DrugBank као потенцијалних инхибитора M2 протеина вируса грипа и провера њихове активности *in vitro*”, Биолошки факултет, Универзитет у Београду, 2021, <https://eteze.bg.ac.rs/application/showtheses?thesesId=8669>

Учествовао је у изради једног дипломског мастер рада:

Степан Степановић – „Поређење структура добивених оптимизацијом δ -рецептора са рендгенском структурном анализом“, Хемијски факултет, Универзитет у Београду, 2012. (захвалница, прилог)

и једног завршног рада (у коме је био члан комисије за одбрану):

Тамара Задрија – „Хипертермија и структура опиоидних рецептора“, Хемијски факултет, Универзитет у Београду, 2013. (прилог)

2.3. Педагошки рад

У периоду 2009-2012 кандидат Милан Сенћански је био ангажован као асистент за извођење експерименталних вежби на предметима Органска хемија 1 и Органска хемија 2 за студенте основних студија Хемијског факултета смерова Дипломирани хемичар, Хемичар за заштиту животне средине и Професор хемије и у периоду 2011-2013 за студенте мастер студија Хемијског факултета на предмету Конформациона анализа.

2.4 Научна сарадња на међународном и националном нивоу

Милан Сенћански је учествовао на следећим COST акцијама:

COST CM1207 GLISTEN (2014-2017)

COST CM 1405 MOLIM – учешће на тренинг школи “From potentials to Dynamics: The starting journey” 30.3-3.4.2016. у Курији, Португалија, из области молекулске спектроскопије

CA18133 European Research Network on Signal Transduction ERNEST (2019-2022)
<https://ernest-gpcr.eu/>

CA18240 Adher'n Rise - Adhesion GPCR Network: Research and Implementation Set the path for future Exploration <https://www.adhernrise.eu/>

2.5 Краћи студијски боравци:

Универзитет у Тартуу, Естонија, Институт за хемију - студијски боравак у периоду 10.9.2018. - 1.10.2018.

COST CM 1207 GLISTEN: мај 2016- јун 2016, кратка научна мисија у трајању од месец дана на Националном институту за хемију, Љубљана, Словенија

У погледу научне сарадње на националном нивоу, др Милан Сенћански интензивно сарађује са Универзитетом у Београду – Хемијским факултетом кроз реализацију пројекта ПРОМИС SYMBIOSIS и COVIDTARGET (радови III-M34-2, III-M22-1) и Универзитетом у Београду – Пољопривредним факултетом (радови II-M21-3, II-M21-7, II-M22-2, III-M21-3, III-M21-6, III-M21-8).

3. Организација научног рада

3.1. Руковођење пројектима и пројектним задацима

Др Милан Сенћански је био шеф билатералног пројекта (са српске стране) са Словенијом „Идентификација пептидомиметика изведених из нанотела који стабилизују функционално конформационо стање бета 2 адренергичног рецептора ($\beta 2AR$)“, број 337-00-21/2020-09/19 у периоду од марта 2020. до октобра 2022., када је ту дужност пренео на др Јелену Милићевић, вишег научног сарадника Института за нукларне науке „Винча”.

Кандидат је руководио пројектним задатком „Развој ISM методе за мале органске молекуле“ у оквиру МПНТР пројекта „Примена ЕИП/ISM биотрансформатичке платформе у откривању нових терапеутских таргета и потенцијалних терапеутских молекула“ (бр пројекта 173001).

4. Квалитет научних резултата

4.1. Утицајност (Хиршов индекс)

Кандидат је до сада био коаутор 42 публикације (од тога 20 после избора у претходно звање) и 21 саопштења (од тога шест после избора у претходно звање). Кандидат је цитиран 339 пута (хетероцитати), 420 пута (без аутоцитата) и 454 пут са аутоцитатима, а Хиршов индекс кандидата износи 10. Цитираност је документована навођењем цитираних публикација, као и публикација у којима су ови радови цитирани (прилог Листа цитираности).

4.2. Параметри квалитета часописа и позитивна цитираност

Параметри квалитета часописа у којима су публиковани радови др Милана Сенћанског приказани су кроз вредност импакт фактора (ИФ, Табела 1) и позиције часописа у одређеној области у библиографији кандидата. Од избора у звање виши научни сарадник, др Милан Сенћански је био коаутор 26 библиографских публикација, од тога 20 научних радова у научним часописима међународног значаја – један категорије М10 (један М14), 19 М20 (један рад М21а, 12 радова М21 и шест радова М22) и шест саопштења на научним скуповима међународног значаја (М34) са укупним коефицијентом $M = 143$ (без нормирања) и укупним ИФ 77,498.

Током целе истраживачке каријере, најцитиранији радови кандидата су I-M21a-1 (58 пута), III-M22-3(40), II-M21-5(22), III-M21-11(17), II-M21-7(16).

У периоду након избора у звање виши научни сарадник, радови са највишим импакт факторима су III-M21-3(5,924), III-M21a-1(5,573), III-M21-1(4,967), III-M22-2(4,927), II-M21-1(4,772), и III-M21-6(4,762).

Табела 1 – Импакт фактори часописа публикованих радова др Милана Сенћанског (целокупна каријера) за одговарајућа годишта публикавања радова.

Рад	ИФ
I-M21a-1	3,5
I-M23-1	1,288
I-M23-2	0,879
I-M23-3	0,879
I-M23-4	0,879
II-M21-1	4,772
II-M21-2	2,576
II-M21-3	3,84
II-M21-4	2,861
II-M21-5	3,452
II-M21-6	4,165
II-M21-7	3,84
II-M21-8	1,984

II-M21-9	2,079
II-M22-1	1,438
II-M22-2	2,608
II-M22-3	1,468
II-M22-4	1,9
II-M22-5	2,507
II-M22-6	1,468
II-M23-1	1,126
III-M21a-1	5,573
III-M21-1	4,967
III-M21-2	4,466
III-M21-3	5,924
III-M21-4	4,155
III-M21-5	4,694
III-M21-6	4,762
III-M21-7	4,122
III-M21-8	3,224
III-M21-9	4,123
III-M21-10	4,431
III-M21-11	2,861
III-M21-12	3,877
III-M22-1	2,911
III-M22-2	4,927
III-M22-3	4,412
III-M22-4	2,305
III-M22-5	3,267
III-M22-6	2,497
УКУПНИ ИФ ТОКОМ ЦЕЛЕ КАРИЈЕРЕ	127,007
УКУПНИ ИФ ПОСЛЕ ИЗБОРА У ЗВАЊЕ ВНС	77,498
ПРОСЕЧНИ ИФ ТОКОМ ЦЕЛЕ КАРИЈЕРЕ	3,175
ПРОСЕЧНИ ИФ ПОСЛЕ ИЗБОРА У ЗВАЊЕ ВНС	4,078

Укупан ИФ радова др Милана Сенђанског за целокупни истраживачки период износи 127,007 а просек ИФ је 3,175. Највећу цитираност после избора у звање вишег научног сарадника имају радови: III-M22-3(40), III-M21-11(17), III-M21-10(12), III-M21a-1(11) и III-M22-6 (10 пута).

Приказ цитираности свих радова из категорије M20 дат је у Табели 2.

Табела 2. Приказ цитираности свих радова др Милана Сенћанског из категорије М20.

Рад	Са аутоцитатима	Без аутоцитата	Хетероцитати
I-M21a-1	58	58	58
I-M23-1	6	4	4
I-M23-2	0	0	0
I-M23-3	2	1	0
I-M23-4	2	1	0
II-M21-1	20	20	15
II-M21-2	6	5	3
II-M21-3	14	13	11
II-M21-4	24	22	14
II-M21-5	26	24	22
II-M21-6	14	13	5
II-M21-7	29	25	16
II-M21-8	13	13	7
II-M21-9	0	0	0
II-M22-1	2	2	2
II-M22-2	10	9	3
II-M22-3	1	1	1
II-M22-4	9	8	8
II-M22-5	9	9	9
II-M22-6	3	3	3
II-M23-1	3	3	3
II- без ИФ	20	14	5
III-M21a-1	16	16	11
III-M21-1	1	1	6
III-M21-2	7	7	0
III-M21-3	5	5	5
III-M21-4	6	6	7
III-M21-5	6	6	6
III-M21-6	5	5	2
III-M21-7	9	8	2
III-M21-8	14	14	5
III-M21-9	13	11	8
III-M21-10	5	5	12
III-M21-11	18	18	17
III-M21-12	7	6	5
III-M22-1	0	0	0

III-M22-2	0	0	0
III-M22-3	41	40	40
III-M22-4	1	0	0
III-M22-5	11	11	9
III-M22-6	18	13	10
УКУПНО	454	420	339

4.3. Ефективни број радова и број радова нормиран на основу броја коаутора

У току реализације научно-истраживачког рада, др Милан Сенћански је активно учествовао у осмишљавању, припреми и извођењу експерименталног рада, обради и дискусији добијених резултата, као и припреми и писању свих радова за публикавање. На основу критеријума који су наведени у Правилнику о поступку и начину вредновања и квантитативном исказивању научно-истраживачких резултата, у периоду након избора у звање виши научни сарадник, 13 радова из категорије III-M20 има више од 7 или 5 аутора и подлежу нормирању према формулама $K/(1+0,2(n-7))$ и $K/(1+0,2(n-5))$, редом.

Рад III-M21a-1 има 12 аутора, тако да је нормирањем добијено 5 поена, а рад III-M21-1 има 9 аутора, тако да је нормирањем добијено 5,714 поена. Рад III-M21-3 такође има 9 аутора, тако да је нормирањем такође добијено 5,714 поена. Рад III-M21-5 има 7 аутора, тако да је нормирањем по формули $K/(1+0,2(n-5))$ добијено 7,143 поена. Рад III-M21-6 има 10 аутора, тако да је нормирањем добијено 5 поена. Рад M21-8 има 10 аутора, тако да је нормирањем добијено 5 поена. Рад III-M21-9 има 10 аутора, тако да је нормирањем добијено 5 поена. Рад III-M21-10 има 9 аутора, тако да је нормирањем добијено 5,714 поена. Рад III-M21-11 има 10 аутора, тако да је нормирањем добијено 5 поена.

Рад III-M22-1 има више од 5 аутора (8), тако да подлеже нормирању по формули $K/(1+0,2(n-5))$, тако да се нормирањем добија 3,125 поена. Рад III-M22-3 има 6 аутора, тако да подлеже нормирању формулом $K/(1+0,2(n-5))$, и добија се вредност од 4,167 поена. Рад III-M22-4 има 8 аутора, по формули $K/(1+0,2(n-7))$ се добија нормирана вредност од 4,167 поена. Рад III-M22-5 има 12 аутора, и по формули $K/(1+0,2(n-7))$ је нормирана вредност поена 2,5.

Саопштење III-M34-2 има 6 аутора и подлеже нормирању по формули $K/(1+0,2(n-5))$, тако да се добија 0,417 поена.

Остали радови имају одговарајући дозвољен број аутора и по наведеном Правилнику не подлежу нормирању.

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

Др Милан Сенћански показује висок степен самосталности у научно-истраживачком раду. Активно је учествовао у конципирању, припреми и извођењу рачунарских симулација, обради и дискусији добијених резултата, као писању и припреми за публикавање и презентацију свих својих научних радова и саопштења. Др Милан Сенћански је током досадашње каријере бавио рачунарским симулацијама биохемијских система – моделовањем протеин-лиганд интеракција, најчешће лек-рецептор и то рачунарским дизајном и пренаменом лекова код хроничних и инфективних болести. Одговарајући рецептори којима се др Милан Сенћански бавио код хроничних болести су углавном ГППЦ рецептори. Што се тиче инфективних болести, кандидат се бавио развојем и пренаменом лекова против вируса инфлуенце, SARS-CoV-2 и вируса Еболе.

Др Сенћански је успешно примењивао методе рачунарске хемије и на теме ван својих основних истраживања, што се види по разноврсној сарадњи са истраживачким групама из земље и иностранства, као и по учествовањима на пројектима COST акција и Фонда за науку Републике Србије.

Др Милан Сенћански је биоинформатичку Методу информационог спектра (Informational Spectrum Method, ISM), која се користи у предикцији протеин-протеин и протеин-ДНК далекосежних интеракција, проширио на предикцију интеракције малих молекула са протеинима (Informational Spectrum Method for Small Molecules, ISM-SM). Ова метода је успешно допунила методу претходно развијених димензионалних дескриптора ЕИР/АQVN и успешно примењена у случају пренамене лекова против COVID-19 (рад III-M22-3). Поред тога, кандидат се успешно бавио молекулским докингом, молекулском динамиком и напредним методама молекулске динамике - рачунањима слободне енергије везивања протеин-лиганд. Такве хардверски захтевне симулације молекулске динамике су рађене коришћењем CUDA технологије на рачунарским кластерима у Институту за нуклеарне науке „Винча”, Националном институту за хемију у Љубљани или радним станицама добијених из средстава пројеката МПНТР или Фонда за науку Републике Србије. Поред тога, кандидат се бавио и биоинформатичким дизајном пептида изведених из протеина и предвиђањем промене ензимске активности увођењем тачкастих мутација, користећи софтвер написан у Лабораторији за биоинформатику и рачунарску хемију у Институту за нуклеарне науке „Винча”. У оквиру пројекта ПРОМИС Symbiosis, др Сенћански се бавио моделовањем интеракција ензим-МОФ. Кандидат је свим рачунарским методама успешно овладао, и показао изузетну сналажљивост у различитим гранама рачунарске хемије.

Током свог студијског борава у Естонији на Институту за хемију у Тартуу код др Алфосо Гарсија-Сосе, колега Сенћански се бавио пренаменом лекова у процесима карциногенезе, што је резултовало публикацијом III-M21-3. Иначе, колега Сенћански и др Гарсија Соса сарађују од 2016. године (публикација II-M21-4).

Током свог студијског борава у Словенији колега Сенћански се бавио симулацијом протеин-пептид интеракција и рачунањима слободне енергије везивања, користећи напредне методе молекулске динамике (метадинамика), што је исходovalo заједничком публикацијом (III-M21-7). Остварена сарадња се потом одржала кроз билатерални пројекат и друге публикације (III-M21-10, III-M21-5, као и саопштења II-M34-3, III-M34-3).

Др Милан Сенћански је показао изузетну научну зрелост и самосталност у организацији научног рада, као и у формирању младих научних кадрова.

4.5. Допринос кандидата реализацији коауторских радова

Др Милан Сенћански је учествовао у конципирању истраживања, реализацији и финалној обради резултата и писању у коауторским радовима из области рачунарске хемије, биоинформатике и дизајна лекова. Од укупно објављена 42 рада у међународним часописима током целокупне каријере, др Милан Сенћански је први коаутор на 15 радова, од тога на једном M10 (III-M14-1), три M21 (од тога је један после избора у последње звање III-M21-7), седам M22 (од тога после избора у последње звање III-M22-1 и III-M22-3) и четири M23, а на седам радова је аутор одговоран за кореспонденцију (II-M22-1,4,5; II-M21-9; II-M23-1; II-M22-3; II-M22-6). У периоду након избора у звање виши научни сарадник, др Милан Сенћански је публиковао један M10 и 19 радова M20 категорије, при чему је први аутор на четири рада (III-M14-1, III-M21-7, III-M22-1 и III-M22-3). Радови у којима је др Милан Сенћански учествовао су резултати сарадње мултидисциплинарних тимова у којима је учествовао како у конципирању истраживања, реализацији и финалној обради резултата, тако и у писању радова и комуникацији са рецензентима чиме је дао кључан или истакнут допринос.

V ИСПУЊЕНОСТ УСЛОВА ЗА СТИЦАЊЕ ПРЕДЛОЖЕНОГ НАУЧНОГ ЗВАЊА НА ОСНОВУ КОЕФИЦИЈЕНТА

МИНИМАЛНИ КВАНТИТАТИВНИ ЗАХТЕВИ ЗА СТИЦАЊЕ ПОЈЕДИНАЧНИХ НАУЧНИХ ЗВАЊА

За природно-математичке и медицинске науке

Минимални квантитативни захтеви за стицање звања виши научни сарадник, природно математичке науке, на основу члана 30, став 1., тачка 5 Закона о науци и истраживањима („Службени гласник РС”, број 49/19) и Правилника о стицању истраживачких и научних звања ("Службени гласник РС", број 159 од 30. децембра 2020.), звање виши научни сарадник може стећи кандидат који има академски назив доктора наука и објављене и рецензиране научне радове и друге научноистраживачке резултате сагласно члану 76, став 6, Закона и критеријумима прописаних правилником, а који укупним научним радом и квалитетом научно-истраживачког рада доприноси развоју одговарајуће научне области. Тражени и остварени резултати Кандидата приказани у Табели 3. за природно-математичке и медицинске науке.

Табела 3. Минимални и остварени број бодова за избор у звање научни саветник.

Диференцијални услов - од првог избора у претходно звање до избора у звање	Потребно је да кандидат има најмање ХХ поена, који треба да припадају следећим категоријама:		
		Неопходно ХХ=	Остварено
Научни саветник	Укупно	70	143 (нормирано 112,161)
Обавезни (1)	M10+M20+M31+M32+M33+M41+M42+M90	50	140 (нормирано 109,244)
Обавезни (2)	M11+M12+M21+M22+M23	35	136 (нормирано 105,244)

VI ЗАКЉУЧАК И ПРЕПОРУКА КОМИСИЈЕ

На основу научно-истраживачких резултата, Комисија констатује да др Милан Сенћански, дипломирани хемичар, доктор физичко хемијских наука, виши научни сарадник, има висок степен самосталности и запажене резултате у научно-истраживачком раду. Др Милан Сенћански је коаутор укупно 40 радова из категорије M20 (2 рада M21a, 21 радова M21, 12 радова M22 и пет радова M23), једног рада категорије M12 и једног некатегорисаног рада значајне цитираности. Након избора у звање виши научни сарадник др Милан Сенћански је коаутор 19 научних радова, пре свега из области рачунарске хемије, који су објављени у часописима међународног значаја M20: један рад категорије M21a, 12 радова M21 и 6 радова M22. Током каријере је објавио и 21 саопштења, од тога 17 на научним скуповима међународног значаја (M34) и четири скупа националног значаја (M64). Од избора у звање вишег научног сарадника је објавио шест саопштења категорије M34. Укупан збир ИФ часописа у којима су објављени радови кандидата након избора у звање виши научни сарадник је 77,498. Укупан збир ИФ за целокупни истраживачки период износи 127,007. Радови

кандидата су према бази SCOPUS на дан 18.12.2022. до сада цитирани 339 пута, 420 пута без аутоцитата, и 454 пут са аутоцитатима, док је вредност Хиршовог индекса 10. Укупна вредност М коефицијента радова од избора у звање виши научни сарадник износи **112,161**, што је више у односу на минимални квантитативни захтев за стицање звања научни саветник. Приказани резултати показују да кандидат својим укупним научно-истраживачким радом и оствареним квалитетом научних публикација значајно доприноси развоју рачунарске хемије, рачунарског моделовања протеин-лиганд интеракција, биформатике и рачунарског дизајна лекова.

Др Милан Сенћански се током своје каријере усавршавао на краћим студијским боравцима у иностранству – Националном институту за хемију у Љубљани и Институту за хемију у Тартуу, Естонији, и оджао те међународне сарадње. Др Сенћански је руководио билатералном пројектом са Словенијом у периоду 2020-2022. Такође, др Сенћански је био коментор у изради једне докторске, а био члан комисије за одбрану две докторске дисертације, учествовао у изради једног мастер рада и био члан комисије за одбрану једног завршног рада.

Имајући у виду целокупан научни допринос др Милана Сенћанског и значај постигнутих резултата, Комисија сматра да су у потпуности испуњени законом предвиђени услови за стицање предложеног научног звања и са задовољством предлаже Наставно-научном већу Универзитета у Београду – Хемијског факултета да прихвати овај извештај и да колегу др Милана Сенћанског предложи надлежној Комисији Министарства науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије за избор у звање НАУЧНИ САВЕТНИК.

У Београду, 30.12.2022.

КОМИСИЈА



др Тамара Тодоровић
редовни професор Универзитета у Београду – Хемијског факултета



др Радивоје Продановић
редовни професор Универзитета у Београду – Хемијског факултета



др Сања Глишић
научни саветник Института за нуклеарне науке „Винча“
Института од националног значаја за Републику Србију
Универзитет у Београду