

Универзитет у Београду – Хемијски Факултет

Наставно-Научном Већу Хемијског Факултета

Универзитет у Београду
ХЕМИЈСКИ ФАКУЛТЕТ
17.07.2024
516/3
20. год.
БЕОГРАД

На седници Наставно-научног већа Универзитета у Београду – Хемијског факултета одржаној 13. јуна 2024. године, одлуком број 516/2 покренут је поступак за избор кандидата др Милана Миловановића у звање **виши научни сарадник**. На истој седници именовани смо за чланове Комисије за оцену резултата научног и стручног рада кандидата. На основу достављене и прикупљене документације о научноистраживачком и педагошком раду кандидата, а у складу са критеријумима Закона о науци и истраживањима ("Сл. гласник РС", бр. 49/2019) и Правилника о стицању истраживачких и научних звања (Службени гласник РС, број 159 од 30. децембра 2020.) подносимо Наставно-научном већу Хемијског факултета Универзитета у Београду следећи:

ИЗВЕШТАЈ

1. БИОГРАФСКИ ПОДАЦИ

Милан Р. Миловановић рођен је 11. 9. 1988. у Књажевцу. Књажевачку гимназију завршио је 2007. године. Хемијски факултет Универзитета у Београду уписао је школске 2007/2008. године. Дипломирао је марта 2012. године при Катедри за општу и неорганску хемију Хемијског факултета, у оквиру истраживачке групе проф. др. Снежане Зарић, са просечном оценом 8,52. Мастер академске студије уписао је школске 2012/2013 године. Мастер тезу под називом „Кристалографско и теоријско испитивање интеракција између молекула воде“ одбранио је на Хемијском факултету септембра 2013, са просечном оценом 10,00, чиме је стекао звање мастер хемичар. Докторске академске студије је на Хемијском факултету Универзитета у Београду уписао је школске 2013/2014 године. Школске 2014/2015 године уписао је и докторске студије на Универзитету у Стразбуру, чиме су његове докторске студије постале докторске студије у удруженом метнорству између Универзитета у Београду и Универзитета у Стразбуру. Докторску дисертацију под називом „Експериментални и теоријски приступи комбиновани са термохемијом реакција у раствору и улога нековалентних интеракција“ одбранио је септембра 2018. године на Универзитету у Стразбуру. Запослен је 2018. године као истраживач-приправник Иновационог центра Хемијског факултета. У звање научног сарадника изабран је 2020. године. У периоду од 2018 до 2019. године био је ангажован као сарадник у настави на Хемијском факултету Универзитета у Београду. Био је члан комисије за оцену једног мастер рада на Хемијском факултету Универзитета у Београду. Боравио је на постдокторским усавршавањима на Универзитету у Стразбуру од октобра 2020. до априла 2021. године и на Универзитету у Грацу од марта 2023. до фебруара 2024. године. Рецензирао је неколико научних радова. Говори енглески и француски језик.

2. БИБЛИОГРАФИЈА РАДОВА

У досадашњој научној каријери др Милан Миловановић објавио је 10 научних радова и 25 саопштења на научним скуповима. После избора у звање научни сарадник др Милан Миловановић објавио је укупно 8 научних радова (2 рада у часописима из категорије међународних часописа изузетних вредности – M21a, 4 рада из категорије врхунских

међународних часописа – M21 и 2 рада у часописима из категорије истакнутих међународних часописа – M22). Учествовао је на укупно 16 научних скупова. Од тога је 2 саопштења са међународних скупова штампано у целини – M33, 10 саопштења са међународних скупова штампаних у изводу – M34 и 4 саопштења са скупова националног значаја штампаних у изводу – M64.

2.1. Научни радови и саопштења објављена после одлуке Наставно-научног већа Хемијског Факултета Универзитета у Београду о покретању поступка за избор у звање научни сарадник (13. 6. 2019. године)

2.1.1. Радови у међународним часописима изузетних вредности (M21a): 2

Укупно бодова, нормирано према броју аутора – $1 \times 10 + 1 \times 10 \times 5/6 = 18.3$

Укупан импакт фактор (ИФ) = 13,288

M21a-1: Milan R. Milovanović, Ivana M. Stanković, Jelena M. Živković, Dragan B. Ninković, Michael B. Hall, Snežana D. Zarić, *Water: new aspect of hydrogen bonding in the solid state*, IUCrJ (2022), 9, 639–647.

<https://doi.org/10.1107/S2052252522006728>

IF(2021) = 5,588; 2/26 Crystallography

Цитираност – „Scopus“ (без аутоцитата, 28. 06. 2024): 8

М нормирано = 8,3

M21a-2: Milan R. Milovanović, Snežana D. Zarić, *New Aspects of Alcohol–Alcohol and Alcohol–Water Interactions: Crystallographic and Quantum Chemical Studies of Antiparallel O–H/O–H Interactions*, Journal of Physical Chemistry Letters (2024) 15, 1294–1304.

<https://doi.org/10.1021/acs.jpcllett.3c03399>

IF(2022) = 5,700; 3/35 Physics, Atomic, Molecular & Chemical

Цитираност – „Scopus“ (без аутоцитата, 28. 06. 2024): 0

М нормирано = 10

2.1.2. Радови у врхунским међународним часописима M21: 4

Укупно бодова, нормирано према броју аутора – $4 \times 8 = 32$

Укупан ИФ = 16,578

M21-1: 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 (2020) 22, 4138–4143.

<https://doi.org/10.1039/C9CP07042G>

IF(2020) = 3,676; 8/37; Physics, Atomic, Molecular & Chemical

Цитираност – „Scopus“ (без аутоцитата, 28. 06. 2024): 13

М нормирано = 8

M21-2: Milan R. Milovanović, Quentin Dherbassy, Joanna Wencel-Delord, Françoise Colobert, Snežana D. Zarić, Jean-Pierre Đukić, *The Affinity of Some Lewis Bases for Hexafluoroisopropanol as a Reference Lewis Acid: An ITC/DFT Study*, ChemPhysChem (2020) 21, 2136–2142.

<https://doi.org/10.1002/cphc.202000560>

IF(2020) = 3,102; 11/37; Physics, Atomic, Molecular & Chemical

Цитираност – „Scopus“ (без аутоцитата, 28. 06. 2024): 5

М нормирано = 8

M21-3: Jelena M. Živković, Milan R. Milovanović, Snežana D. Zarić, *Hydrogen Bonds of Coordinated Ethylenediamine and Water Molecule. Joint Crystallographic and Computational Study*, Crystal Growth & Design (2022), 22, 5198–5205.

<https://doi.org/10.1021/acs.cgd.2c00196>

IF(2022) = 3,800; 6/26 Crystallography

Цитираност – „Scopus“ (без аутоцитата, 28. 06. 2024): 6

М нормирано = 8

M21-4: Milan R. Milovanović, Jelena M. Živković, Dragan B. Ninković, Snežana D. Zarić, *Potential energy surfaces of antiparallel water-water interactions*, Journal of Molecular Liquids (2023) 389, No. 122758.

<https://doi.org/10.1016/j.molliq.2023.122758>

IF(2022) = 6,000; 5/37; Physics, Atomic, Molecular & Chemical

Цитираност – „Scopus“ (без аутоцитата, 28. 06. 2024): 1

М нормирано = 8

2.1.3. Радови у истакнутим међународним часописима (M22): 2

Укупно бодова, нормирано према броју аутора – 2 x 5 = 10

Укупан ИФ = 4,920

M22-1: Milan R. Milovanović, Snežana D. Zarić, Yann Cornaton, Jean-Pierre Đukić, *Joint Isotherm Calorimetric Titration–DFT Investigation of the Demethoxy-Amination of Fischer Carbenes*, Journal of Organometallic Chemistry (2020) 929, 121582.

<https://doi.org/10.1016/j.jorganchem.2020.121582>

IF(2020) = 2,369; 32/57 Chemistry, Organic

Цитираност – „Scopus“ (без аутоцитата, 28. 06. 2024): 1

М нормирано = 5

M22-2: Milan R. Milovanović, Mélanie Boucher, Yann Cornaton, Snežana D. Zarić, Michel Pfeffer, Jean Pierre Đukić, *The Thermochemistry of Alkyne Insertion into a Palladacycle Outlines the Solvation Conundrum in DFT*, European Journal of Inorganic Chemistry (2021) 2021, 4690–4699.

<https://doi.org/10.1002/ejic.202100750>

IF(2021) = 2,551; 21/46 Chemistry, Inorganic & Nuclear

Цитираност – „Scopus“ (без аутоцитата, 28. 06. 2024): 2

М нормирано = 5

2.1.4 Саопштења са међународних скупова штампана у целини (M33): 2

Укупно бодова M33 – 2 x 1 = 2

M33-1: Milovanović, Milan R.; Živković, Jelena M.; Ninković, Dragan B.; Blagojević, Jelena P.; Zarić, Snežana D., *Benzene and water – different or similar?*, 2nd International Conference on Chemo and Bioinformatics (ICCBIG_2023), Book of Proceedings, September 28th – 29th 2023, Kragujevac, Serbia.

M33-1: Milovanović, Milan R.; Živković, Jelena M.; Stanković, Ivana M.; Ninković, Dragan B.; Zarić, Snežana D., *Repulsive water-water contacts from Cambridge Structural Database*, 2nd International Conference on Chemo and Bioinformatics (ICCBIG_2023), Book of Proceedings, September 28th – 29th 2023, Kragujevac, Serbia.

2.1.5. Саопштења са међународних скупова штампана у изводу M34: 10

Укупно бодова M34 – 10 x 0,5 = 5

M34-1: Milovanović, Milan R.; Andrić, Jelena M.; Ninković, Dragan B.; Stanković, Ivana M.; Zarić, Snežana D., *Structure of water molecule and water hydrogen bonding: joint Cambridge Structural Database and ab-initio calculation study*, Book of Abstracts, 1st International Conference on Noncovalent Interactions (ICNI 2019), Book of Abstracts, September 2nd – 6th 2019, Lisbon, Portugal.

M34-2: Milovanović, Milan R.; Dherbassy, Quentin; Wencel-Delord, Joanna; Colobert, Françoise; Zarić, Snežana D.; Djukic, Jean-Pierre, *Joint ITC and DFT Study of the Affinity of Some Lewis Bases to HIFP in Solution*, The 4th International Symposium on Halogen Bonding (ISXB4), Book of Abstracts, November 2nd – 5th 2020, Stellenbosch University, South Africa.

M34-3: Milovanovic, Milan R.; Zivkovic, Jelena M.; Ninkovic, Dragan B.; Stankovic, Ivana M.; Zarić, Snežana D., *How flexible is the water molecule structure? Cambridge Structural Database and ab initio calculations study*, 25th Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography, Book of Abstracts, August 14th – 22th 2021, Prague, Czech Republic.

M34-4: Milovanović, Milan R.; Živković, Jelena M.; Ninković, Dragan B.; Blagojević Filipović, Jelena P.; Vojislavljević-Vasilev, Dubravka Z.; Veljković, Ivana S.; Stanković, Ivana M.; Malenov, Dušan P.; Medaković, Vesna; Veljković, Dušan Ž.; Zarić, Snežana D., *Study of noncovalent interactions using crystal structure data in Cambridge Structural Database*, 25th Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography, Book of Abstracts, August 14th – 22th 2021, Prague, Czech Republic.

M34-5: Milovanović, Milan R.; Živković, Jelena M.; Ninković, Dragan B.; Blagojević Filipović, Jelena P.; Vojislavljević-Vasilev, Dubravka Z.; Veljković, Ivana S.; Stanković, Ivana M.; Malenov, Dušan P.; Medaković, Vesna; Veljković, Dušan Ž.; Zarić, Snežana D., *Study of noncovalent interactions using crystal structure data and quantum chemical calculations*, 15th International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry, Book of Abstracts, September 20th – 24th 2021, Belgrade, Serbia.

- M34-6:** Milovanović, Milan R.; Živković, Jelena M.; Zarić, Snežana D., *Joint Crystal Structure and Computational Study of Hydrogen Bonds of Ethylenediamine*, 25th International Conference on the Chemistry of the Organic Solid State (ICCOSS XXV), Book of Abstracts, July 3rd – 8th 2022, Ohrid, Macedonia.
- M34-7:** Živković, Jelena M.; Milovanović, Milan R.; Zarić, Snežana D., *Hydrogen bonds of coordinated ethylenediamine and water*, 2nd International Conferences on Noncovalent Interactions (ICNI2022), Book of abstracts, July 18th – 22th 2022, Strasbourg, France.
- M34-8:** Zarić, Snežana D.; Milovanović, Milan R.; Stanković, Ivana M.; Živković, Jelena M.; Ninković, Dragan B.; Hall, Michael B., *Antiparallel interactions as a mode of hydrogen bonding: Case of water in solid state*, 17th International Congress of Quantum Chemistry (17thICQC), Book of Abstracts, June 26th – July 1st 2023, Bratislava, Slovakia.
- M34-9:** Milovanović, Milan R.; Živković, Jelena M.; Ninković, Dragan B.; Blagojević, Jelena P.; Zarić, Snežana D., *Differences and Similarities in Benzene/Benzene and Water/Water Interactions*, Modeling Interactions in Biomolecules IX, Book of Abstracts, September 10th – 14th 2023, Pruhonice, Prague-Pruhonice, Czech Republic.
- M34-10:** Milovanović, Milan R.; Živković, Jelena M.; Ninković, Dragan B.; Blagojević, Jelena P.; Zarić, Snežana D., *Antiparallel Noncovalent Interactions*, The van der Waals-London Discussions, Book of Abstracts, October 26th – 27th 2023, Strasbourg, France.

2.1.6. Саопштења са домаћих скупова штампана у изводу М64: 4

Укупно бодова М64 – 4 x 0,2 = 0,8

- M64-1:** Ninković, Dragan B.; Veljković, Dušan Ž.; Malenov, Dušan P.; Milovanović, Milan R.; Živković, Jelena M.; Stanković, Ivana M.; Veljković, Ivana S.; Medaković, Vesna; Blagojević Filipović, Jelena P.; Vojislavljević–Vasilev, Dubravka Z., *Noncovalent interactions of metal complexes and aromatic molecules*, XXVI Conference of the Serbian Crystallographic Society, Book of Abstracts, June 27th – 28th 2019, Srebrno jezero, Serbia.
- M64-2:** Milovanović, Milan R.; Andrić, Jelena M.; Medaković, Vesna; Djukic, Jean-Pierre; Zarić, Snežana D., *The influence of the substituents on the interactions in phosphine–borane pairs*, XXVI Conference of the Serbian Crystallographic Society, Book of Abstracts, June 27th – 28th 2019, Srebrno jezero, Serbia.
- M64-3:** Milovanović, Milan R.; Živković, Jelena M.; Ninković, Dragan B.; Stanković, Ivana M.; Zarić, Snežana D., *Are the bond angles of water molecules in crystal structures reliable? Joint cambridge structural database and ab-initio calculation analysis*, XXVI Conference of the Serbian Crystallographic Society, Book of Abstracts, June 27th – 28th 2019, Srebrno jezero, Serbia.
- M64-4:** Milovanović, Milan R.; Djukic, Jean-Pierre; Zarić, Snežana D., *Thermochemistry of organometallic reactions in solution: joint ITC and DFT study*, 7th Conference of the Young Chemists of Serbia, Book of Abstracts, November 2nd 2019, Belgrade, Serbia.

**2.2. Научни радови и саопштења објављена пре одлуке Наставно-научног већа
Универзитета у Београду – Хемијског Факултета о покретању поступка за избор у
звање научни сарадник (13. 6. 2019.)**

2.2.1. Радови у међународним часописима изузетних вредности (M21a): 2

Укупно бодова, нормирано према броју аутора – $1 \times 10 = 10$

Укупан импакт фактор (ИФ) = 6,732

M21a-1: Milan R. Milovanović, Jelena M. Andrić, Vesna B. Medaković, Jean-Pierre Đukić, Snežana D. Zarić, *Investigation of Interactions in Lewis Pairs Between Phosphines and Boranes by Analyzing Crystal Structures from the Cambridge Structural Database*, Acta Crystallographica (2018) B74, 255–263.

<https://doi.org/10.1107/S2052520618003736>

IF(2018) = 6,732; 1/26 Crystallography

Цитираност – „Scopus“ (без аутоцитата, 28. 06. 2024): 5

М нормирано = 10

2.2.2. Радови у врхунским међународним часописима M21: 1

Укупно бодова, нормирано према броју аутора – $1 \times 8 = 8$

Укупан ИФ = 5,160

M21-1: Dang Ho Binh, Milan Milovanović, Julia Puertes-Mico, Mustapha Hamdaoui, Snežana D. Zarić, Jean-Pierre Đukić, *Is the R3Si Moiety in Metal-Silyl Complexes a Z Ligand? Answer from the Interaction Energy*, Chemistry - A European Journal, (2017) 23, 17058–17069.

<https://doi.org/10.1002/chem.201703373>

IF(2017) = 5,160; 33/171 Chemistry, Multidisciplinary

Цитираност – „Scopus“ (без аутоцитата, 28. 06. 2024): 26

М нормирано = 8

2.2.3. Саопштења са међународних скупова штампана у изводу M34: 3

Укупно бодова M34 – $3 \times 0,5 = 1,5$

M34-1: Milovanović, Milan R.; Andrić, Jelena M.; Janjić, Goran V.; Ninković, Dragan B.; Zarić, Snežana D., *The influence of water molecule coordination on geometry and strength of hydrogen bonds*, SupraChem@Balkans.eu - International Workshop "Sensing Applications of Supramolecular Chemistry", Book of Abstracts, May 2012, Plovdiv, Bulgaria.

M34-2: Andrić, Jelena M.; Ninković, Dragan B.; Misini, Majda; Milovanović, Milan R.; Zarić, Snežana D., *The influence of water molecule coordination to a metal ion on water hydrogen bonds*, 15th JCF-Frühjahrssymposium, Book of Abstracts, 2013, Berlin, Germany.

M34-3: Milovanović, Milan R.; S. Dohm; Hansen A.; Zarić, Snežana D.; Djukic, Jean-Pierre; Grimme, Stefan, *Benchmarking to DFT-d calculations by ITC experimental data*, 1st Journal of Thermal Analysis and Calorimetry Conference and 6th V4 (Joint Czech-Hungarian-Polish-Slovakian) Thermoanalytical Conference, Book of Abstracts, June 2017, Budapest, Hungary.

2.2.6. Саопштења са домаћих скупова штампана у изводу M64: 6

Укупно бодова M64 – 6 x 0,2 = 1,2

M64-1: Andrić, Jelena M.; Milovanović, Milan R.; Janjić, Goran V.; Zarić, Snežana D., *Strong hydrogen bonds of coordinated water. Influence of metal cation on water hydrogen bonds*, XIX Conference of the Serbian Crystallographic Society, Book of Abstracts, May 2012, Bela Crkva, Serbia.

M64-2: Andrić, Jelena M.; Milovanović, Milan R.; Misini, Majda; Zarić, Snežana D., *Theoretical and crystallographic study of hydrogen bonds in tetrahedral complexes; comparison with octahedral complexes*, XX Conference of the Serbian Crystallographic Society, Book of Abstracts, June 2013, Avala, Serbia.

M64-3: Andrić, Jelena M.; Misini, Majda; Milovanović, Milan R.; Zarić, Snežana D., *Interactions of coordinated water molecules. Correlation of electrostatic potentials with interaction energies of aqua complexes*, Suprachem@Balkans.eu - Summer School on Applied Supramolecular Chemistry, Book of Abstracts, August 2013, Belgrade, Serbia.

M64-4: Andrić, Jelena M.; Janjić, Goran V.; Milovanović, Milan R.; Zarić, Snežana D., *Attractive interactions between non-hydrogen bonded water molecules*, XXII Conference of the Serbian Crystallographic Society, Book of Abstracts, June 2015, Smederevo, Serbia.

M64-5: Milovanović, Milan R.; Andrić, Jelena M.; Zarić, Snežana D., *Crystallographic investigation of interactions between phosphines and boranes*, XXIV Conference of the Serbian Crystallographic Society, Book of Abstracts, June 2017, Vršac, Serbia.

M64-6: Milovanović, Milan R.; J. M. Andrić; Medaković, Vesna B.; J.-P. Djukic; Zarić, Snežana D., *Are phosphine-borane pairs classical or frustrated? – Analysis of Cambridge Structural Database*, XXV Conference of the Serbian Crystallographic Society, Book of Abstracts, June 2018, Bajina Bašta, Serbia.

Докторска дисертација, M71: 1

Укупно бодова M71 – 1 x 6 = 6

M71-1: Милан Р. Миловановић, *Експериментални и теоријски приступи комбиновани са термохемијом реакција у раствору и улога нековалентних интеракција*, Универзитет у Стразбуру—Докторска школа за хемију (ЕД 222), Laboratoire de Chimie et Systématique Organométalliques (LCSOM), de l'Institut de Chimie de Strasbourg (UMR 7177); Универзитет у Београду—Хемијски факултет, септембар 2018.

3. АНАЛИЗА ПУБЛИКОВАНИХ РАДОВА НАКОН ИЗБОРА У ЗВАЊЕ НАУЧНИ САРАДНИК

У досадашњем научном раду др Милан Миловановић примарно се бавио проучавањем нековалентних интеракција методама рачунарске хемије, укључујући квантно-хемијске прорачуне и хемијску информатику. Нековалентне интеракције статистички су анализирани на основу података добијених из Кембричке базе структурних података – CSD. На основу такве анализе могу се добити подаци о заступљености појединих интеракција, типовима интерагујућих фрагмената, као и преовлађујућим геометријама одређених контаката. Упоредо са претрагом базе података кадинат је проучавао интеракције и квантно-хемијским прорачунима, чиме се добијају подаци о оптималним геометријама, енергији интеракције и природи интеракције (применом прорачуна декомпозиције енергије и рачунањем мапа електростатичког потенцијала). Кадитдат је поучавао улогу нековалентних интеракција и експеримантним путем, пре свега променом Изотермалне титрационе калориметрије. За време боравка на Универзитету у Грацу, кандидат се бавио и синтезом потенцијалних цитотоксичних једињења базираних на комплексима оксо-ренијума (V) и апигенина (природног пигмента камилице).

Кадинат се најчешће бавио проучавањем нековалентних интеракција у системима који укључују молекуле воде (или молекуле које садрже ОН групу). Наиме проучавани су двокомпонентни системи: вода-вода, вода-етилендиамин, вода-алкохол и алкохол-алкохол. Радови који се баве овим системима (M21a-1, M21a-2, M21-1, M21-3, M21-4) представљају прву групу радова. У другу групу радова спадају радови који су се бавили експеримантним проучавањем термохемије и нековалентних интеракција различитих система у растворима. Наиме, проучавани су: афинитет различитих Луисових база према хексафлуороизопропанолу (M21-2); реакције аминолитизе Фишерових карбена (M22-1); реакције инсерције алкина у цикличене паладијумове комплексе (M22-2).

У раду **M21a-1** урађена је претрага Кембричке базе структурних података са циљем да се пронађу вода-вода контакти код којих је растојање између кисеоника мање од 4 ангстрема. Добијено је око 10000 контаката. Ови контакти су анализирани и систематизовани на основу њихових геометрија. За све контакте израчунате су енергије интеракција на веома тачном нивоу теорије, тј. на CCSD(T)/CBS нивоу. Резултати су показали да постоји 6729 привлачних вода-вода контаката, од чега 4717 представљају класичне водоничне везе са енергијом интеракције углавном већом од -3,3 kcal/mol. Већина преосталих привлачних интеракција су антипаралелне диполарне интеракције, код којих су О—Н везе два интерагујућа молекула воде оријентисане антипаралелно једна према другој. Установљени су геометријски параметри који веома прецизно описују овај тип интеракција. Енергије интеракција ових антипаралелних интеракција могу бити сличне енергијама интеракција класичних водоничних веза (до -4,7 kcal/mol), док већина ових контаката има енергије интеракције у опсегу од -0.9 до -2.1 kcal/mol. Овом студијом је сугерисано да геометријски критеријуми за дефинисање привлачних вода-вода интеракција треба да буду шири од постојећих критеријума за класичне водоничне везе. Промена критеријума којим се дефинишу ове интеракције могла би утицати на откривање до сада неоткривених интеракција које контролишу молекуларне структуре и хемију уопште.

У раду **M21a-2** проучаване су, пре свега, антипаралелне О-Н/О-Н интеракције (као нови начин водоничног везивања) у димерима алкохол-алкохол и алкохол-вода. Проучавање је било базирано на анализи података из Кембричке базе структурних података (CSD) и израчунавању површина потенцијалних енергија на веома тачном квантно-хемијском нивоу, тј. на CCSD(T)/CBS нивоу. Резултати су показали постојање антипаралелних интеракција у кристалним структурама ових система и значајне енергије антипаралелних интеракција. Наиме, подаци из CSD-а за алкохол-алкохол димере показују да 49,2% контаката су контакти

са класичним водоничним везама, а да 10,1% контаката су контакти са антипаралелним интеракцијама, док је за алкохол-вода димере 59,4% контаката су класичне водоничне везе и само 0,6% контаката су антипаралелне интеракције. Израчунато је да су енергије класичних водоничних веза код алкохол-алкохол димера до $-6,2$ kcal/mol, а код алкохол-вода димера до $-6,5$ kcal/mol. Енергије антипаралелних интеракција у алкохол-алкохол димерима су до $-4,7$ kcal/mol, а у алкохол-вода димерима до $-4,4$ kcal/mol. Докомпозицијом енергија интеракција утврђено је да су антипаралелне интеракције електростатичке природе.

У раду **M21-1** показано је да молекули воде из кристалних структура архивираних у CSD-у показују релативно велики распон како угла (H-O-H) тако и дужина O-H веза. *Ab initio* прорачуни на врло високом нивоу теорије, тј. на CCSD(T)/aug-cc-PV6Z нивоу, предвидели су могућност за енергетски јефтине (± 1 kcal/mol) промене угла и дужине веза у широком опсегу: H-O-H угао од $96,4$ до $112,8^\circ$ и O-H везе од $0,930$ до $0,989$ ангстрема.

У раду **M21-3** проучаване су водоничне везе између некоординаног и координаног етилендиамин и молекула воде на основу података из Кембричке база структурних података (CSD) и DFT прорачуна. Анализом података из CSD-а за координани етилендиамин утврђено је да су O \cdots H растојања претежно у опсегу од $2,0$ – $2,1$ ангстрема, док угао α (N-H \cdots O) показује изразиту тенденцију за опсег од 150 – 160° . DFT прорачуни урађени су за октаедарску геометрију комплекса кобалта(II), бакра(II) и никла(I) и квадратно-планарну геометрију комплекса паладијума(II). Утврђено је да координација етилендиамин за јоне метала јача његову водоничну везу са молекулом воде. Наиме, некоординани етилендиамин и молекул воде имају енергију интеракције од $-2,3$ kcal/mol, док се за координан етилендиамин енергија интеракција креће од $-4,0$ до $-28,0$ kcal/mol у зависности од металног јона и наелектрисања комплекса. Енергије водоничних веза су у доброј корелацији са израчунатим електростатичким потенцијалом на атому водоника који учествује у интеракцији. Координациони број и оксидационо стање метала имају значајан утицај на електростатички потенцијал водониковог атома који учествује у интеракцији као и на саму енергију водоничних веза.

У раду **M21-4** показано је да су антипаралелне вода-вода интеракције значајан вид интераговања између два молекула воде и да играју важну улогу у течной води. Систематски је израчуната површина потенцијалне енергије антипаралелних вода-вода интеракција на веома тачном нивоу теорије, тј. на CCSD(T)/CBS нивоу. Резултати су показали да најстабилнија геометрија антипаралелних вода-вода интеракција има енергију интеракције од $-4,22$ kcal/mol и торзиони угао H-O-H-O од 140° . Значајан део антипаралелних вода-вода интеракција има енергије интеракције негативније од $-2,0$ kcal/mol. Угао α (O-H \cdots O) најстабилнијих геометрија антипаралелних вода-вода интеракција је у опсегу од 110° – 120° . Поређењем са класичним водоничним везама у димеру воде показано је да класичне водоничне везе са вредностима угла $\alpha < 140^\circ$ имају енергију интеракције до $-3,2$ kcal/mol, док је значајан број антипаралелних вода-вода интеракција јачи од њих. Такође, показано је да је антипаралелна геометрија прелазно стање ниске баријере између два водонично везана минимума код којих су акцепторско-донорске улоге два молекула воде замењене.

У раду **M21-2** испитивана је термохемија формирања Луисових киселинско-базних комплекса између 1,1,1,3,3,3-хексафлуоропропан-2-ола (HFIP) – Луисове киселине, и серије од 8 различитих Луисових база (три сулфоксида, три деривата пиридина, један ароматични амин и један циклични алифатични етар). Проучавање је било засновано на изотермалној титрационој калориметрији (ITC) и статичним DFT-D прорачунима. Истраживања су имала за циљ проналажење могуће улоге HFIP-а као и стварање референтне базе експерименталних термохемијских података формирања адуката HFIP-Луисва база. Измерене ITC енталпије асоцијације биле су у опсегу од $-9,3$ до -14 kcal/mol. Израчунате DFT-D енталпије асоцијације са континуалним моделом растварача (од $-8,5$ до $-12,7$ kcal/mol) биле су сличне експерименталним вредностима. Додатним прорачунима, утврђено је да растварач

(хлоробензен) утиче на благо повећање Гибсових слободних енергија асоцијације. Са тим у вези, сугерисано је да чист HFIP, интерагујући са Луисовим базама, може имати значајан утицај у каталитичким процесима не само преко динамичког микроструктурисања реакционе средине већ и експлицитније - утичући на поларност веза у Луисовим базама.

У раду **M22-1** проучавана је термохемија реакције аминолизе Фишерових карбена: пентакарбонил(фенилметоксиалкилиден)-хром(0), -молибден(0) и -волфрам(0) са три амина, и то бензиламином, анилином и пиридином. Проучавање је било довјако, и експериментално и теоријско. Енталпије свих реакција експериментално су одређене изотермалном титрационом калориметријом (ИТС) у хлоробензену на 298,15 степени по Келвину. У скоро свим случајевима, ΔH су биле негативније од -15 kcal/mol, што указује да су трансформације енергетски повољне за све аmine осим за анилин. Показано је да нема значајне зависности енталпије реакција у односу на природу атома метала карбенског комплекса. Такође, ИТС експериментима је потврдјено да су реакције у односу на амин парцијалног другог реда. Показано је да се теоријске COSMO-DFT енталпије реакције, које су биле у распону од око -5,5 kcal/mol до -20 kcal/mol, одлично слажу са експерименталним вредностима. Гибсове слободне енергије, израчунате на истом нивоу теорије, сугеришу спонтане процесе за све трансформације осим оних који укључују анилин.

У раду **M22-2** проучавана је термохемија врло добро познате реакције инсерције алкина у цикличне комплексе паладијума. Иако је механизам инсерције незасићених супстрата у Pd-C везу цикличних комплекса паладијума познат, није било никаквих информација о термохемији таквих трансформација. Проучавање је било засновано на изотермалној титрационој калориметрији (ИТС) и DFT-D прорачунима. Проучавана су два алкина, (дибензил-етин и диацетил-етин) и један циклопаладијумски комплекс. Енталпије ових реакција одређене су ИТС-ом у хлоробензену као растварачу. DFT-D прорачуни су потврдили да је корак који одређује брзину реакције инсерција првог молекула алкина, што је било у сагласности и са подацима добијеним ИТС експериментима. Са друге стране, израчунате DFT-D са континуалним моделом растварача енталпије реакција биле су прилично различите од оних добијеним ИТС експериментима, што је објашњено тиме да је потребно користити експлицитне молекуле растварача у прорачунима. Тиме је такође сугерисано да улога растварача није занемарљива, као то да не би требало да буде занемарена.

За. ПЕТ НАЈЗНАЧАЈНИЈИХ НАУЧНИХ ОСТВАРЕЊА КАНДИДАТА У ПЕРИОДУ ОД ИЗБОРА У НАУЧНО ЗВАЊЕ НАУЧНИ САРАДНИК СА ОБРАЗЛОЖЕЊЕМ

- 1) **M21a-1:** Milan R. Milovanović, Ivana M. Stanković, Jelena M. Živković, Dragan B. Ninković, Michael B. Hall, Snežana D. Zarić, *Water: new aspect of hydrogen bonding in the solid state*, IUCr (2022), 9, 639–647.
<https://doi.org/10.1107/S2052252522006728>
IF(2021) = 5,588; 2/26 Crystallography
Цитираност – „Scopus“ (без аутоцитата, 28. 06. 2024): 8
М нормирано = 8,3

У овом раду по први пут је урађена детаљна анализа вода-вода контаката добијених претрагом Кембричке базе структурних података. За све контакте израчунате су енергије интеракција на веома тачном нивоу теорије, тј. на CCSD(T)/CBS нивоу. Показано је да око

20% свих привлачних контаката представљају антипаралелне диполарне интеракције. Установљени су геометријски параметри који веома прецизно описују овај тип интеракција. Енергије интеракција ових антипаралелних интеракција могу бити сличне енергијама интеракција класичних водоничних везама (до $-4,7$ kcal/mol). Овом студијом сугерисано је геометријски критеријуми који описују привлачне вода-вода интеракције треба да буду шири од постојећих критеријума за класичне водоничне везе. То би могло да утиче на откривање до сада неоткривених интеракција које контролишу молекуларне структуре и хемију уопште.

- 2) **M21a-2:** Milan R. Milovanović, Snežana D. Zarić, *New Aspects of Alcohol-Alcohol and Alcohol-Water Interactions: Crystallographic and Quantum Chemical Studies of Antiparallel O-H/O-H Interactions*, *Journal of Physical Chemistry Letters* (2024) 15, 1294–1304.
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcclett.3c03399>
IF(2022) = 5,700; 3/35 Physics, Atomic, Molecular & Chemical
Цитираност – „Scopus“ (без аутоцитата, 28. 06. 2024): 0
М нормирано = 10

У овом раду по први пут су проучаване антипаралелне О-Н/О-Н интеракције (као нови начин водоничног везивања) у алкохол-алкохол и алкохол-вода димерима. Показано је да антипаралелних интеракција има у кристалним структурама ових система, као и да су енергије антипаралелних интеракција значајно велике. Наиме, према подацима из CSD-а за алкохол-алкохол димере 10,1% контаката су контакти саантипаралелним интеракцијама, док за алкохол-вода димере само 0,6% контаката су антипаралелне интеракције. CCSD(T)/CBS енергије антипаралелних интеракција у алкохол-алкохол димерима су до $-4,7$ kcal/mol, а у алкохол-вода димерима до $-4,4$ kcal/mol, што је упоредиво са енергијама класичних водоничних веза за ове системе које су до $-6,5$ kcal/mol. Утврђено је да су антипаралелне интеракције електростатичке природе.

- 3) **M21-1:** 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* (2020) 22, 4138–4143.
<https://doi.org/10.1039/C9CP07042G>
IF(2020) = 3,676; 8/37; Physics, Atomic, Molecular & Chemical
Цитираност – „Scopus“ (без аутоцитата, 28. 06. 2024): 13
М нормирано = 8

У овом раду по први пут су систематски урађени прорачуни на молекулу воде у контексту Н-О-Н угла и О-Н веза. *Ab initio* прорачуни на врло високом нивоу теорије, тј. на CCSD(T)/aug-cc-PV6Z нувоу, предвидели су могућност за енергетски јефтине (± 1 kcal/mol) промене угла и дужине веза у широком опсегу: $16,4^\circ$ за Н-О-Н угао и 0,059 ангстрема за О-Н везе. Овиме је показано да је молекул воде прилично флексибилан, и, са тим вези, да се прилично лако може адаптирати окружењу.

- 4) **M21-4:** Milan R. Milovanović, Jelena M. Živković, Dragan B. Ninković, Snežana D. Zarić, *Potential energy surfaces of antiparallel water-water interactions*, *Journal of Molecular Liquids* (2023) 389, No. 122758.
<https://doi.org/10.1016/j.molliq.2023.122758>
IF(2022) = 6.000; 5/37; Physics, Atomic, Molecular & Chemical

Цитираност – „Scopus“ (без аутоцитата, 28. 06. 2024): 1

М нормирано = 8

У овом раду по први пут је систематски израчуната површина потенцијалне енергије антипаралелних вода-вода интеракција на веома тачном нивоу теорије, тј. на CCSD(T)/CBS нивоу. Израчунато је више од 20000 геометрија. Показано је да су антипаралелне вода-вода интеракције значајан вид интераговања између два молекула воде и да играју важну улогу у течной води. Најстабилнија геометрија антипаралелних вода-вода интеракција има енергију интеракције од -4,22 kcal/mol и торзиони угао H-O-H-O од 140°. Угао α (O-H...O) најстабилнијих геометрија антипаралелних вода-вода интеракција је у опсегу 110°–120°. Значајно је да је приличан број антипаралелних вода-вода интеракција јачи од класичних водоничних веза са $\alpha < 140^\circ$ (које имају енергију интеракције до -3,2 kcal/mol). Такође, показано је да је антипаралелна геометрија прелазно стање ниске баријере између два водонично везана минимума.

- 5) **M21-3:** Jelena M. Živković, Milan R. Milovanović, Snežana D. Zarić, *Hydrogen Bonds of Coordinated Ethylenediamine and Water Molecule. Joint Crystallographic and Computational Study*, *Crystal Growth & Design* (2022), 22, 5198–5205.

<https://doi.org/10.1021/acs.cgd.2c00196>

IF(2022) = 3,800; 6/26 Crystallography

Цитираност – „Scopus“ (без аутоцитата, 28. 06. 2024): 6

М нормирано = 8

У овом раду показано је да координација етилендиамина за јоне метала јача његову водоничну везу са молекулом воде. На основу DFT прорачуна некоординовани етилендиамин и молекул воде имају енергију интеракције од -2,3 kcal/mol, док се за координован етилендиамин енергије интеракција крећу од -4,0 до -28,0 kcal/mol у зависности од металног јона и наелектрисања комплекса. Енергије водоничних веза су у доброј корелацији са израчунатим електростатичким потенцијалом на атому водоника који учествује у интеракцији. Координациони број и оксидационо стање метала имају значајан утицај на електростатички потенцијал водониковог атома који учествује у интеракцији као и на саму енергију водоничних веза. Анализом података из CSD-а за координовани етилендиамин утврђено је да су O...H растојања претежно у опсегу од 2,0–2,1 ангстрема, док угао α (N-H...O) показује изразиту тенденцију за опсег од 150–160°.

4. КВАЛИТАТИВНА ОЦЕНА НАУЧНОГ ДОПРИНОСА

4.1. Квалитет научног рада

4.1.1. Параметри квалитета часописа у којима су радови објављени, утицајност и цитираност радова

Радови др Милана Миловановића објављени су у међународним научним часописима високог квалитета. Кандидат је у досадашњој каријери објавио три рада у међународним

часописима изузетних вредности (M21a), пет радова у врхунским међународним часописима (M21), као и два рада из категорије истакнутих међународних часописа (M22). Укупан импакт фактор свих објављених радова износи 46,678 (узимајући у обзир период када су објављени, према критеријумима Правилника), што у просеку чини 4,668 по раду. Посебно се истиче рад објављен 2022. године у часопису *IUCr*, који је у периоду објављивања рада имао импакт фактор 5,588. У периоду од покретања поступка за избор у звање научни сарадник, 2019. године до данас, др Милан Миловановић објавио је два рада из категорије M21a, четири рада из категорије M21 и два рада из категорије M22.

Према подацима базе Scopus, радови др Милана Миловановића били су цитирани 77 пута (67 пута без аутоцитата), док Хиршов индекс износи 5 (5 без аутоцитата) на дан 28. јуна 2024. године. Цитираност појединачних радова дата је у следећој табели:

Рад (видети библиографију)	Број цитата (без аутоцитата)
M21a-1*	8
M21a-2*	0
M21-1*	13
M21-2*	5
M21-3*	6
M21-4*	1
M22-1*	1
M22-2*	2
M21a-1**	5
M21-1**	26

* Радови објављени после стицања звања научни сарадник.

** Радови објављени пре стицања звања научни сарадник.

4.1.2. Нормирање броја поена према броју коаутора

Само један објављени рад др Милана Миловановића сходно критеријумима прописаним Правилником подлеже нормирању.

4.1.3. Степен самосталности

Др Милан Миловановић показује висок степен самосталности у научном раду, што је илустровано чињеницом да је први аутор у већини објављених радова (8 од 10). Учествовао је у свим фазама реализације радова, од осмишљавања теме истраживања, добијања и интерпретације резултата, дискусије и писања радова. Био је учесник 25 међународних и домаћих научних конференција на којима су приказани резултати истраживања у којима је кандидат учествовао.

4.1.4. Рецензирање научних радова

Др Милан Миловановић је до сада рецензирао два научна рада у међународном часопису *Chemical Papers*, који се налази на ISI SCI листи, као и шест научних радова у међународном часопису *Open Chemistry*, који се такође налази на ISI SCI листи.

4.2. Организација научног рада – учешће на пројектима и руковођење пројектним задацима

У оквиру ангажовања на пројекту ОИ 172065 под називом „Нековалентне интеракције п-система и њихова улога у молекулском препознавању“, којим је руководила проф. др Снежана Зарић, финансираном од стране Министарства просвете, науке и технолошког развоја, др Милан Миловановић руководио пројектним задатком „Водоничне везе између молекула воде“.

У оквиру ангажовања на пројекту Met-Effect - „Metal complexes of a naturally inspired framework functionalized for cytotoxic and catalytic efficiency“, финансираног средствима Марија Скловска-Кири програма Размене особља у Оквирном програму ЕУ за истраживње и развој Хоризонт Европа (2021-2027), којим је руководила др Љиљана Михајловић Лалић, др Милан Миловановић руководио пројектним задацима: а) синтеза и карактеризација лигананда, б) синтеза и потпуна $Re(V)$ комплекса.

4.3. Ангажованост у развоју услова за научни рад, образовање и формирање научних кадрова

4.3.1. Допринос развоју науке у земљи

Научни рад др Милана Миловановића одвија се у оквиру истраживачке групе којом руководи проф. др Снежана Зарић, редовни професор Хемијског факултета Универзитета у Београду. Истраживачка група се бави теоријским испитивањем различитих типова нековалентних интеракција на основу анализе структурних база података и коришћењем квантно-хемијских прорачуна. Кандидат се примарно ангажовао на испитивању молекула воде, као и нековалентних интеракција између молекула воде, молекула воде и молекула алкохола и између два молекула алкохола.

Најзначајнији допринос др Милана Миловановића развоју науке је његов допринос у препознавању новог типа водоничне везе између два молекула воде. Треба нагласити да је молекул воде један од најпроучаванијих молекула до сада. Познато да је молекул воде гради водоничне везе, како са другим молекулима воде, тако и са другим поларним молекулима. У свом научном раду др Милан Миловановић показао је да поред класичних водоничних веза, два молекула воде могу градити и нови тип водоничних веза, које су назване антипаралелне интеракције, у којима су ОН групе два молекула воде у антипаралелној оријентацији. Анализом свих кристалних структура у Кембричкој кристалографској банци података показано је да 70% привлачних интеракција између два молекула воде представљају класичне водоничне везе, а да 20% представља нови тип интеракција, антипаралелне интеракције. Прорачуни енергија интеракција, урађени веома тачном методом, CCSD(T)/CBS методом, показују да је енергија најјаче класичне водоничне везе око -5.0 kcal/mol, док је енергија антипаралелне интеракције врло слична, око -4.7 kcal/mol. Антипаралелне интеракције могу бити јаче од слабе класичне водоничне везе, па је то разлог зашто се ове интеракције јављају релативно често (20%) у кристалним структурама. Поред тога, израчунавање комплетне потенцијалне површине антипаралелних интеракција на CCSD(T)/CBS нивоу, показало је значај ових интеракција за воду у течном стању, јер су антипаралелне интеракције прелазно стање између две класичне водоничне везе. С обзиром

да је разлика у енергији између овог прелазног стања и класичне водоничне везе мања од 1 kcal/mol, оно се може често јавити у течной води. Др Милан Миловановић показао је да овај нови тип водоничне везе граде и молекули алкохола.

У истраживачком раду др Милана Миловановића по први пут су систематски урађени квантно-хемијски прорачуни везани за флексибилност молекула воде, претага Кембричке базе структурних података за вода-вода, вода-алкохол и алкохол-алкохол контакте, као и прорачуни енергија интеракције за сва три горе поментута система на веома тачном нивоу теорије, тј. на CCSD(T)/CBS нивоу. Овим је по први пут утврђено: а) да је молекул воде прилично флексибилан, б) да поред класичних водоничних веза кристалним структурама са вода-вода и алкохол-алкохол контактима постоји значајан број контаката (око 20 %) са такозваним антипаралелним ОН-ОН интеракцијама; в) да енергија антипаралелних ОН-ОН интеракција може бити до - 4,7 kcal/mol, што је упоредиво са енергијама класичних водоничних веза које у овим системима могу бити до -6,5 kcal/mol. Значајно је и то да су енергије антипаралелних ОН-ОН интеракција далеко веће у односу на класичне водоничне везе када су углови водоничних веза мањи од 140°. Истраживачка група проф. Зарић показала је и потенцијалну важност антипаралелних ОН-ОН интеракција. У склопу ових истраживања др Милан Миловановић био је коаутор рада објављеног у међународном часопису изузетних вредности из области хемије *IUCr*, у коме су испитиване класичне и антипаралелне интеракције између молекула воде.

Са друге стране, др Милан Миловановић се бавио експерименталним истраживањима нековалентних интеракција и улогом растварача у реакционим системима који су обихватили комплексе: паладијума, мангана, хрома, молибдена и волфрама као и оних који су садржали 1,1,1,3,3,3-хексафлуоро-пропанол и фрустриране фосфин-боран Луисове парове. Ова истраживања била су базирана на техници изотермалне титрационе калориметрије. Закључено је да је у свим испитиваним системима улога нековалентних интеракција значајна, као и то да улога растварача не би требало да буде занемарена.

У оквиру постдокторског истраживања на Универзитету у Грацу, др Милан Миловановић бавио се синтезом оксо-ренијум(V) комплекса са апигенином (лигандом који се налази у природи – природни пигмент камилице). Успешно је синтетисано и окарактерисано неколико таквих комплекса, који су показали значајне каталитичке способности. Ови комплекси би такође могли бити и потенцијално цитотоксични, чиме би њихова примена могла да се прошири и на поље науке које се бави лечењем рака.

4.3.2. Педагошки рад

У оквиру свог педагошког рада др Милан Миловановић био је ангажован на извођењу вежби на курсу Основи хемије (за студенте Физичког факултета) током 2018/2019. и 2019/2020. године.

4.3.3. Менторство при изради дипломских, мастер и докторских радова

Др Милан Миловановић учествовао је у раду комисије за оцену једног мастер рада.

4.3.4. Међународна научна сарадња

Др Милан Миловановић боравио је на постдокторском усавршавању на Универзитету у Стразбуру у периоду од 15. октобра 2020. године до 15. априла 2021. године и на Универзитету у Грацу у периоду од марта 2023. године до фебруара 2024. године. На Универзитету у Стразбуру био је ангажован на истраживању реакција инсерције алкина у орвано-паладијумеве комплексе у групи др Жан-Пјер Ђукића (fr. Jean-Pierre Djukic), са којим је настављена сарадња. Његов боравак у Стразбуру био је кофинансиран од стране Министарства образовања, науке и технолошког развоја Републике Србије. На Универзитету у Грацу био је ангажован на пројекту Met-Effect - „Metal complexes of a naturally inspired framework functionalized for cytotoxic and catalytic efficiency”, финансираног средствима Марија Скловска-Кири програма Размене особља у Оквирном програму ЕУ за истраживње и развој Хоризонт Европа (2021-2027). Под менторством др Јорг Шахнера (aus. Jörg Schachner) др Милан Миловановић бавио се синтезом природно инспирисаних орвано-ренијумских комплекса са потенцијаном цитотоксичном и каталитичком активношћу. Са др Јорг Шахнером ће такође бити настављена сарадња у будућности. Поред тога, др Милан Миловановић је коаутор на једом раду са проф. др Мајклом Холлом (en. Michael Hall) са Тексас А&М универзитета у Колеџ Стејшну, САД, са којим група проф. др Снежане Зарић има дугогодишњу успешну сарадњу.

5. ОЦЕНА ИСПУЊЕНОСТИ КВАНТИТАТИВНИХ УСЛОВА ЗА СТИЦАЊЕ НАУЧНОГ ЗВАЊА ВИШИ НАУЧНИ САРАДНИКА

Минимални квантитавни захтеви за стицање звања виши научни сарадник дати су у следећој табели. На основу приказаних података следи да др Милан Миловановић испуњава све квантитативне услове за избор у научно звање виши научни сарадник.

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:		Остварено
Виши научни сарадник	Укупно	50	68,1
Обавезни (1)	M10 + M20 + M31 + M32 + M33 + M41 + M42 + M90	40	62,3
Обавезни (2)	M11 + M12 + M21 + M22 + M23	30	60,3

6. ЗАКЉУЧЦИ И ПРЕПОРУКЕ КОМИСИЈЕ

Комисија констатује да је Милан Р. Миловановић, доктор хемијских наука, научни сарадник Иновационог центра Хемијског факултета у Београду, остварио запажене резултате у свом досадашњем научном раду.

Најзначајнији допринос др Милана Миловановића развоју науке је његов допринос у препознавању новог типа водоничне везе између два молекула воде. Треба нагласити да је молекул воде један од најпроучаванијих молекула до сада. Познато да је молекул воде гради водоничне везе, како са другим молекулима воде, тако и са другим поларним молекулима. У свом научном раду др Милан Миловановић показао је да поред класичних водоничних веза, два молекула воде могу градити и нови тип водоничних веза, које су назване антипаралелне интеракције, у којима су ОН групе два молекула воде у антипаралелној оријентацији. Анализом свих кристалних структура у Кембричкој кристалографској банци података показано је да 70% привлачних интеракција између два молекула воде представљају класичне водоничне везе, а да 20% представља нови тип интеракција, антипаралелне интеракције. Прорачуни енергија интеракција, урађени веома тачном методом, CCSD(T)/CBS методом, показују да је енергија најјаче класичне водоничне везе око -5.0 kcal/mol, док је енергија антипаралелне интеракције врло слична, око -4.7 kcal/mol. Антипаралелне интеракције могу бити јаче од слабе класичне водоничне везе, па је то разлог зашто се ове интеракције јављају релативно често (20%) у кристалним структурама. Поред тога, израчунавање комплетне потенцијалне површине антипаралелних интеракција на CCSD(T)/CBS нивоу, показало је значај ових интеракција за воду у течном стању, јер су антипаралелне интеракције прелазно стање између две класичне водоничне везе. С обзиром да је разлика у енергији између овог прелазног стања и класичне водоничне везе мања од 1 kcal/mol, оно се може често јавити у течној води. Др Милан Миловановић показао је да овај нови тип водоничне везе граде и молекули алкохола.

У његовим радовима по први пут је урађена систематска студија о флексибилности молекула воде, као и анализа, квантификација и класификација антипаралелних ОН-ОН интеракција, као нови аспект водоничних веза, а у системима вода-вода, вода-алкохол и алкохол-алкохол. У свим поменитим системима (укупно преко 32000 различитих гометрија) енергије интеракција рачунате су на веома позуданом нивоу теорије, тј. на CCSD(T)/CBS нивоу. Показан је потенцијални значај антипаралелних ОН-ОН интеракција.

Такође, др Милан Миловановић чествовао је и у експерименталним истраживањима у области нековалентних интеракција и улогом растварача у реакционим системима који су обихватили комплексе: паладијума, мангана, хрома, молибдена и волфрама као и оних који су садржали 1,1,1,3,3,3-хексафлуоро-пропанол и фрустриране фосфин-боран Луисове парове. Ова истраживања била су базирана на техници изотермалне титрационе калориметрије. Закључено је да је у свим испитиваним системима улога нековалентних интеракција значајна, као и то да улога растварача не би требало да буде занемарена.

У оквиру постдокторског истраживања на Универзитету у Грацу, др Милан Миловановић бавио се синтезом оксо-ренијум(V) комплекса са апигенином (лигандом који се налази у природи – природни пигмент камилице). Успешно је синтетисано и окарактерисано неколико таквих комплекса, који су показали значајне каталитичке способности. Ови комплексни би такође

могли бити и потецијално цитотоксичи, чиме би њихова примена могла да се прошири и на поље науке које се бави лечењем рака.

Његови радови су објављени у високо квалитетним међународним научним часописима и остварили су значајну цитираност. Наиме, др Милан Миловановић је до сада објавио 10 радова са укупним импакт фактором 46,678 што чини 4.668 по раду. Његови радови су до сада цитирани 77 пута (67 пута без аутоцитата), док Хиршов индекс износи 5 (5 без аутоцитата). Након избора у тренутно научно звање кандидат је објавио осам радова, од тога два из категорије M21a, четири из категорије M21 и два из категорије M22. Објавио је и 25 саопштења на научним скуповима, од тога 16 након избора у тренутно научно звање. Укупна вредност M коефицијента након избора у тренутно научно звање износи 68,1.

Др Милан Миловановић руководио је пројекетним задацима у оквиру два научно-истраживачка пројекта. Учествовао је у раду комисије за оцену једног мастер рада на Хемијском факултету Универзитета у Београду. Кандидат је рецензирао и осам радова у међународним научним часописима.

На основу изложених података и личног увида у научни рад кандидата комисија закључује да др Милан Миловановић испуњава све неопходне критеријуме и на основу тога предлаже Наставно-научном већу Универзитета у Београду – Хемијског факултета да прихвати овај извештај и подржи избор др Милана Миловановића у звање виши научни сарадник.

У Београду, 15. јула 2024.

КОМИСИЈА

др Снежана Зарић, редовни професор
Универзитет у Београду – Хемијски факултет

др Драган Нинковић, виши научни сарадник
Иновациони центар Хемијског факултета у Београду

др Горан Богдановић, научни саветник
Универзитет у Београду – Институт за нуклеарне науке „Винча“