

## НАСТАВНО-НАУЧНОМ ВЕЋУ ФАКУЛТЕТА ЗА ФИЗИЧКУ ХЕМИЈУ

**Предмет:** Извештај комисије за оцену и одбрану урађене докторске дисертације кандидата мастер физикохемичара Бранислава Миловановића.

Одлуком Наставно-научног већа Факултета за физичку хемију са IV редовне седнице одржане 18.01.2022. године именовани смо за чланове Комисије за оцену и одбрану урађене докторске дисертације кандидата **мастер физикохемичара Бранислава Миловановића**, под насловом: **Квантнохемијско проучавање супрамолекулских структура гуанина**.

Израда докторске дисертације под наведеним насловом одобрена је одлуком Наставно-научног већа са V редовне седнице од 14.02.2020. године. На основу те одлуке, Веће научних области природних наука Универзитета у Београду је на својој III седници од 27.02.2020. године, дало сагласност да се прихвати предложена тема докторске дисертације.

На основу прегледа и анализе докторске дисертације кандидата, Комисија подноси Наставно-научном већу Факултета за физичку хемију Универзитета у Београду следећи

### ИЗВЕШТАЈ

#### **А. Приказ садржаја докторске дисертације**

Докторска дисертација кандидата маст. физ.-хем. Бранислава Миловановића је написана на 135 страна са прилозима, у складу са упутством за обликовање докторске дисертације Универзитета у Београду. Ова докторска дисертација садржи следећа поглавља: **Увод** (9 страна), **Преглед резултата** (17 страна), **Закључак** (две стране), **Литература** (10 страна са 159 литературних навода), **Биографија** (са библиографијом на четири стране) и **Прилози** (81 страна) који садрже изјаве прописане правилима Универзитета у Београду и објављене научне радове са дозволама за пренос ауторских права за сваког од издавача у чијем је часопису објављен научни рад. На основу члана 23. став 3, Правилника о докторским студијама на Универзитету у Београду, Сената Универзитета у Београду, од 13.04.2016. године, односно на основу члана 18. став 3. Правилника о докторским студијама, о изради, оцени и одбрани докторске дисертације Факултета за физичку хемију Универзитета у Београду, од 18.01.2022. године, ова докторска дисертација је конципирана као скуп објављених научних радова, који представљају тематску целину. Докторска дисертација садржи три оригиналне слике које су коришћене у уводу рада.

У поглављу **Увод** су описани типови гуанинских супрамолекулских структура које су предмет истраживања ове докторске дисертације. Такође, кроз текст поглавља **Увод** је дат кратак преглед претходних истраживања која су од интереса за предмет истраживања ове докторске дисертације. У оквиру три потпоглавља су представљени предмет и циљеви истраживања, коришћена методологија и списак објављених научних радова.

Поглавље **Преглед резултата** је подељено у четири целине у којима су укратко представљени резултати из објављених научних радова са темељним прегледом претходних истраживања: интеракција гуанинског квартета са металопорфиринским комплексима (покрива резултате из једног научног рада), афинитет квадруплекса према катјонима (покрива резултате из једног научног рада), утицај структуре и типа катјона на побуђена стања квадруплекса (покрива резултате из три научна рада), самоорганизација и оптичка својства ковалентно декорисаних гуанинских нанотрака (покрива резултате из једног научног рада).

Поглавље **Закључак** по ставкама сумира све резултате и закључке истраживања из ове докторске дисертације.

У поглављу **Литература** су наведене референце по редоследу њиховог појављивања у тексту у складу са упутством за обликовање докторске дисертације.

У поглављу **Биографија** је дата кратка биографија кандидата на једној страни, а у наставку је дата библиографија кандидата на три стране.

Поглавље **Прилози** поред Изјаве о ауторству, Изјаве о истоветности штапане и електронске верзије докторског рада и Изјаве о коришћењу, садржи и шест објављених научних радова у целости са дозволама за пренос ауторских права за сваког од издавача у чијем је часопису објављен научни рад пре самог научног рада.

## **Б. Опис резултата докторске дисертације**

Предмет истраживања у овој докторској дисертацији су својства супрамолекулских структура гуанина са акцентом на интеракцијама гуанинских квартета ( $G_4$ ) са металопорфиринским комплексима, природи интеракције катјона из централног јонског канала са квадруплексима, енергетици самоорганизације ковалентно супституисаних гуанина у нанотраке на графену, побуђеним стањима квадруплекса и нанотрака. Посебна пажња је посвећена својствима побуђених стања ових система у смислу идентификовања стања са преносом наелектрисања и могућих начина за њихову модулацију са акцентом на утицаје супрамолекулског дизајна, типа катјона у систему и присуства молекула растварача. Целокупни резултати у оквиру ове докторске дисертације су добијени уз помоћ неколико квантохемијских метода и молекулске динамике са пољем сила. Од квантохемијских метода је коришћена теорија функционала густине (DFT) и временски зависна теорија функционала густине (TDDFT) у комбинацији стандардним функционалима и базним скуповима. Поред DFT метода, коришћена је и семиемпиријска метода чврсте везе заснована на теорији функционала

густине (DFTB). Дисперзионе интеракције су узете у обзир уз помоћ D3 модела, а имплицитни растварач помоћу COSMO модела.

Проучаван је утицај присуства металопорфиринског комплекса на истежућу вибрацију карбонилне групе гуанина унутар G<sub>4</sub>. Израчунат је спектар снаге истежуће вибрације карбонилне групе као Фуријеова трансформација аутокорељационе функције промене дужине карбонилне везе која је добијена из молекулске динамике на бази DFT методе. Показано је да померај у инфрацрвеном делу спектра (спектра снаге), у зависности од присуства различитих катјона у оквиру металопорфиринског комплекса, може да се употреби за праћење начина везивања оваквих или сличних лиганата од значаја у анти-туморним терапијама. Молекулском динамиком је такође потврђено да је могуће уздати се у резултате статичких прорачуна ових система што је од значаја за будућа истраживања ове проблематике.

Испитан је и афинитет квадруплекса према двоструко наелектрисаним јонима унутар централног јонског канала за неке од експериментално доступних структура синтетички добијених квадруплекса. Прорачунима на бази DFT и применом методе разлагања енергије интеракције катјона са квадруплексима је утврђено да би одређени супрамолекулски дизајн ових структура, односно наизменично постављени квартети гуанина и цитозина (са молекулима воде), могао да резултира да двовалентни катјони буду координисани у свакој суседној шупљини унутар централног јонског канала квадруплекса упркос њиховом јаком електростатичком одбијању. Овакве структуре би потенцијално биле интересантне са становишта молекулске електронике јер се за њих очекује да имају повољне особине побуђених стања, односно ниско лежећа стања са преносом наелектрисућа (CS стања).

Главни део истраживања у оквиру ове докторске дисертације се односи на анализу утицаја катјона и растварача на побуђена стања квадруплекса. Теоријски приступ је подразумевао да се поред положаја и интензитета прелаза испитује и карактер побуђених стања. Прорачуни су изведени уз помоћ TDDFT методе а потом је анализирана и једноелектронска матрица прелаза, како би се једнозначно окарактерисала побуђена стања. Најпре је израчунат апсорпциони спектар за G<sub>4</sub> структуре у присуству различитих катјона алкалних метала. Показано је да присуство различитих катјона алкалних метала не утиче значајно на електронске апсорпционе спектре ових система али и да би флуоресцентни одговор требало да се разликује због присуства различитих катјона, што може да послужи у аналитичким испитивањима ових система. У случају сложенијих, вишеслојних квадруплекса, израчунавањем и анализом електронских апсорпционих спектра је запажена значајна стабилизација CS стања, и то испод светлих  $\pi\pi^*$  стања у спектрима. Овакви закључци су значајни са аспекта примене ових система у молекулској електроници имајући у виду способност самоорганизације гуанина/гуанозина у овакве структуре у растворима. Испитан је и утицај растварача (воде) третирајући молекуле воде експлицитно (помоћу кластера) и имплицитно (помоћу COSMO модела). Утврђено је да присуство воде додатно стабилизује CS стања. Укључивањем експлицитних молекула воде у разматрање, идентификована су и стања

код којих је ексцитовани електрон локализован на неколико молекула воде, што указује на могући механизам генерисања гуанинског радикала у оквиру квадруплекса.

Последња целина истраживања је посвећена испитивању супрамолекулске организације декорисаних молекула гуанина у молекулске нанотраке на графену. Главни део овог истраживања је изведен уз помоћ DFTB методе, док су анализе интеракција између јединица које чине гуанинске траке и процена валидности DFTB резултата урађене DFT методом. Показано је да молекули гуанина супституисани 2,5,8,11-тетрахексилперилен-3,4:9,10-би(дикарбоксимид) (PDI) молекулима уместо вертикално наслаганих структура испољавају тенденцију ка формирању мономолекулског слоја који прекрива велике површине на графену. Испитане су и карактеристике побуђених стања за ове системе и утврђено је да постоје велике сличности са синтетисаним водонично-везаним органским мрежама сличних молекула. Овакве нанотраке су занимљиве са становишта молекулске електронике, будући да их је могуће експериментално синтетисати.

## **В. Упоредна анализа резултата докторске дисертације са подацима из литературе**

Нуклеотидне азотне базе граде каноничне секундарне структуре нуклеинских киселина захваљујући Вотсон-Криковом начину спаривања. Поред овог начина молекулског препознавања, одређене нуклеобазе испољавају способност да се међусобно спарују и Хугстиновим типом водоничних веза. Гуанин се на крајевима линеарних хромозома спарује у планарне мотиве који се састоје од по четири молекула гуанина чинећи гуанински квартет  $G_4$ . Узастопно наслагани квартети стабилизирани нековалентним интеракцијама сачињавају гуанинске квадруплексе<sup>[1]</sup>. При *in vivo* условима на крајевима линеарних хромозома код еукариотских организама, квадруплекси имају вишеструке биолошке улоге од којих је најзначајнија она која се односи на контролисање механизма који доприносе формирању тумора<sup>[2]</sup>. Уз гуанин, од нуклеобаз тенденцију ка формирању квартета испољавају и аденин, цитозин и урацил што може резултирати и мешовитим квадруплексима. Иако се ради о секундарним структурама нуклеинских киселина, гуанински квадруплекси (GQ) се могу срести и у растворима уз присуство различитих катјона<sup>[3]</sup>, односно у виду нанотрака на површинама у одсуству катјона<sup>[4]</sup>. Оваква способност самоорганизације чини ове структуре интересантним са аспекта нанотехнологије.

Биолошка улога квадруплекса је темељно проучавана дуги низ година. Испитивана је потенцијална улога порфирина за интеракцију са  $GQ$ <sup>[5]</sup>, будући да је лиганд планаран, а може да везује катјоне  $Mg^{2+}$  и  $Ca^{2+}$ . Као што је већ поменуто, улога GQ у контролисању механизма који доводе до формирања тумора може бити модификована присуством планарних лиганата у систему. С тим у вези, у оквиру ове докторске дисертације је испитиван утицај  $Mg^{2+}$  и  $Ca^{2+}$  јона на стабилност комплекса порфирин-катјон- $G_4$  као и на истежућу вибрацију карбонилне групе гуанина која испољава црвени померај у случају гуанинских квадруплекса, односно интеракције кисеоника и катјона из

централног јонског канала квадруплекса. Анализа спектра снаге (израчунатог као Фуријеова трансформација аутокорелационе функције брзине добијене из молекулске динамике засноване на DFT методи) је показала да присуство катјона има значајан утицај на инфрацрвени спектар. Претходна истраживања су такође указивала на осетљивост истежуће вибрације карбонилне групе на нековалентне интеракције GQ.

Интеракција различитих катјона са GQ је детаљно анализирана (наводимо једну репрезентативну референцу<sup>[6]</sup>). Један од главних закључака претходних истраживања је да су при *in vivo* условима у највећој мери присутни Na<sup>+</sup> и K<sup>+</sup> јони, као и да се потенцијалном заменом ових јона може проузроковати да GQ изгуби своју биолошку функцију. Такође, катјони са малим јонским радијусима могу довести до дестабилизације GQ. Двовалентни јони се јаче везују од моновалентних јона, с тим да заузимају сваку другу слободну позицију у оквиру централног јонског канала, услед међусобно јаког електростатичког одбијања. Допринос ове докторске дисертације се огледа и у разумевању интеракција које доводе до овог ефекта, односно какав супрамолекулски дизајн квадруплекса може да омогући да се дво валентни јони нађу у свакој доступној шупљини квадруплекса. Ово је значајно са аспекта нанотехнологије с обзиром да истраживања указују на потенцијал ових структура као система за пренос наелектрисања, молекулских разделника наелектрисања, као и система који опонашају антена комплексе. С тим у вези, испитане су експериментално доступне кристалне структуре квадруплекса у којима су дво валентни катјони везани у свакој доступној шупљини квадруплекса. Примењена је метода разлагања енергије интеракције заснована на DFT методи на моделу који укључује имплицитни растварач. Резултати ових прорачуна су указали на то да је замена Na<sup>+</sup> јона Ca<sup>2+</sup> јонима у воденој средини између сваког суседног G<sub>4</sub> слоја неповољна, као и да је могуће да мешовити квадруплекси попут оног код кога се налазе наизменично наслагани G<sub>4</sub> слојеви и квартети цитозина са по четири молекула воде вежу дво валентне јоне у свакој суседној шупљини. Овакав повољан ефекат се приписује присуству молекула воде који су саставни део квартета цитозина и који омогућавају да се катјони јаче вежу за њихове атоме кисеоника него за атоме кисеоника гуанина. Геометрија овог квадруплекса такође фаворизује и пренос наелектрисања са кисеоника на катјоне што додатно умањује електростатичко одбијање. Овакви закључци су значајни за боље разумевање начина припреме квадруплекса у воденим растворима. Такође, овакав начин везивања дво валентних катјона у централном јонском каналу може фаворизовати заступљеност CS стања у електронским спектрима услед присуства јаког електричног поља које потиче управо од катјона.

Управо је велики део истраживања GQ и сличних система посвећен проучавању њихових побуђених стања. У спектрима GQ, услед интеракције идентичних хромофора, доминирају прелази који су окарактерисани као Френкелови ексцитони и прелази са преносом наелектрисања, тј. СТ прелази<sup>[7]</sup>. Утицај катјона на спектре ових система је значајан и огледа се у томе да је интермолекулски пренос енергије ефикаснији, док је флуоресцентни одговор система различит у присуству Na<sup>+</sup> и K<sup>+</sup> јона. Дакле, може се закључити да катјони утичу на спектралне карактеристике ових система. Оно што се у литератури није могло наћи до тренутка израде ове докторске дисертације је утицај дво валентних катјона, односно дво валентних катјона који су везани у свакој доступној

шупљини централног јонског канала квадруплекса. Са биолошког становишта, GQ након апсорпције ултраљубичастог зрачења може произвести гуанински радикал катјон, за који се претпоставља да учествује у оксидативним процесима унутар ДНК<sup>[8]</sup>. Три рада чији су резултати представљени у оквиру ове докторске дисертације су посвећена изучавању утицаја структуре и катјона на побуђена стања квадруплекса употпуњавајући недостатке у до сада доступној литератури. У свим радовима је коришћена TDDFT методологија и израчунати су вертикални спектри. Из добијених резултата је анализирана матрица густине једноелектронског прелаза. Резултати истраживања на G<sub>4</sub> моделу су у складу са резултатима претходних истраживања у оквиру којих су спектри ових система окарактерисани као мешавина прелаза који одговарају Френкеловим ексцитонима и СТ прелазима. Такође, присуство јона значајно утиче на положај максимума флуоресцентног спектра G<sub>4</sub> система. Ова појава се приписује великој дисторзији система у геометрији минимума S<sub>1</sub> стања, будући да је ексцитација локализована на једном од молекула гуанина, а одговарајуће стање је окарактерисано као  $\pi\pi^*$  стање. Истраживање је настављено на већим системима, на два наслагана G<sub>4</sub> слоја која чине октет. Изведене су симулације молекулске динамике на бази DFT методе које су указале на већу ригидност структура са катјонима земноалкалних метала у поређењу са катјонима алкалних метала. Такође, анализом побуђених стања код система са земноалкалним металима се примећује веће раздвајање првог и другог светлог стања, хипсохромни померај  $\pi\pi^*$  стања, као и стабилизација СТ стања. На примеру система са Na<sup>+</sup> јоном укључивањем експлицитних молекула воде детектована су стања код којих се ексцитовани електрон на крају ексцитације локализује на молекулима воде. Ова стања су детектована у широком опсегу енергије што је у складу са претходним истраживањима. Даље су испитивани квадруплекси који унутар централног јонског канала координишу два катјона земноалкалних метала између сваког суседног квартета, односно сваког другог квартета<sup>[9]</sup>. Истраживање побуђених стања оваквих система у оквиру ове докторске дисертације је прво истраживање овог типа. Резултати су указали на висок садржај CS стања код свих система као и на постојање CS стања која су окарактерисана ексцитацијом електрона из  $\pi$  орбитале локализованих на гуанинима у виртуелне  $d$  орбитале катјона. Ова стања су детектована код система који садрже Ca<sup>2+</sup>, односно Ba<sup>2+</sup> јоне између сваког слоја квадруплекса. Солватацијом једног од система експлицитним молекулима воде примећени су исти ефекти као и код система са Na<sup>+</sup> јонима. Целокупно истраживање везано за побуђена стања ових система у оквиру ове докторске дисертације је засновано на анализи једноелектронске матрице прелаза. Резултати су показали да се ради о системима који имају значајан удео CS стања у вертикалним спектрима, као и да се садржај ових стања може мењати супрамолекулским дизајном, односно величином система, типом катјона и присуством различитих типова квартета.

Последња целина истраживања у оквиру ове докторске дисертације се односи на самоорганизацију и оптичка својства ковалентно декорисаних гуанинских нанотрака. У литератури се налазе разни примери самоорганизованих структура у растворима и на површинама од којих се посебно истичу риленске боје с обзиром на повољне оптичке особине. Функционализацијом нуклеобаза (гуанина) са молекулима риленских боја

могуће је добити тзв. водонично-везане органске мреже<sup>[10]</sup>. Коришћењем различитих оптички активних јединица је могуће добити и различите особине побуђених стања ових система. Конкретно, у случају гуанин-PDI (GPDI) система детектовано је дугоживеће CS стање, што је приписано делокализацији ексцитованог електрона на суседним PDI хромофорима. Сличне карактеристике побуђених стања се срећу и код водонично-везаних органских мрежа организованих на површинама. Такође, на високо уређеном пиролизичком графиту могуће је добити самоорганизоване структуре разних риленских боја. Поред риленских боја као супституенти гуанина/гуанозина у литератури се помињу и олиготиофени, олиго(*p*-фе-нилен-винилен), бор-дипирометен и бутилфинеил. Као алтернатива водонично-везаним органским мрежама, у оквиру ове докторске дисертације је разматрана самоорганизација гуанина декорисаних молекулима PDI у нанотраке. Теоријски приступ је у овом случају поред DFT и TDDFT метода подразумевао и коришћење DFTB методе услед великог компјутационог оптерећења. Ради поређења, истим методама су третиране и водонично-везане органске мреже које су претходно експериментално анализирани. Водонично-везане органске мреже овог типа су до сада проучаване само са класичним потенцијалима тј. пољима сила<sup>[10]</sup> како би се објаснили резултати добијени рендгеноструктурном анализом. Истраживање у оквиру ове докторске дисертације је показало да нема јединствених праваца у којима би се ови молекули гуанина супституисани са PDI организовали на графену. Повољне интеракције између суседних молекула гуанина, као и између суседних молекула PDI, омогућавају формирање два типа нанотрака. Испитане су и наслагане конформације нанотрака и водонично-везаних органских мрежа. Закључак је да би овакве нанотраке на графену испољавале тенденцију ка расту у равни графена, уместо формирања вертикалних наслаганих структура. Анализом густине стања утврђено је да нанотраке и водонично-везане органске мреже имају сличне електронске структуре. Коначно, показана је и сличност вертикалног електронског апсорпционог профила, односно садржаја густине побуђених електронских стања. Нешто већи удео CS стања је пронађен у спектру нанотрака, што је приписано повољној просторној организацији PDI јединица. Код нанотрака су идентификована CS стања која су код водонично-везаних органских мрежа окарактерисања као дугоживећа, што би потенцијално било интересантно са аспекта оптоелектронике. CS стања се код ових система могу настанити и директном апсорпцијом фотона те тако представљају атомски танке хетероструктуре графен- GPDI и потенцијалне компоненте за фотоволтаике.

- [1] J. R. Williamson, M. K. Raghuraman, and T. R. Cech, "Monovalent cation-induced structure of telomeric DNA: The G-quartet model," *Cell*, vol. 59, no. 5, pp. 871–880, 1989.
- [2] D. M. Feldser and C. W. Greider, "Short telomeres limit tumor progression in vivo by inducing senescence," *Cancer Cell*, vol. 11, no. 5, pp. 461–469, 2007.
- [3] J. T. Davis and G. P. Spada, "Supramolecular architectures generated by self-assembly of guanosine derivatives," *Chem. Soc. Rev.*, vol. 36, no. 2, pp. 296–313, 2007.
- [4] A. Ciesielski, M. El Garah, S. Masiero, and P. Samorì, "Self-assembly of natural and unnatural nucleobases at surfaces and interfaces," *Small*, vol. 12, no. 1, pp. 83–95, 2016.
- [5] G. Jia, Z. Feng, C. Wei, J. Zhou, X. Wang, and C. Li, "Dynamic insight into the

- interaction between porphyrin and G-quadruplex DNAs: Time-resolved fluorescence anisotropy study,” *J. Phys. Chem. B*, vol. 113, no. 50, pp. 16237–16245, Dec. 2009.
- [6] F. Zaccaria, G. Paragi, and C. Fonseca Guerra, “The role of alkali metal cations in the stabilization of guanine quadruplexes: why  $K^+$  is the best,” *Phys. Chem. Chem. Phys.*, vol. 18, no. 31, pp. 20895–20904, 2016.
- [7] F.-A. Miannay, A. Banyasz, T. Gustavsson, and D. Markovitsi, “Excited states and energy transfer in G-quadruplexes,” *J. Phys. Chem. C*, vol. 113, no. 27, pp. 11760–11765, Jul. 2009.
- [8] A. Banyasz *et al.*, “Absorption of low-energy UV radiation by human telomere G-quadruplexes generates long-lived guanine radical cations,” *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 139, no. 30, pp. 10561–10568, Aug. 2017.
- [9] M. P. H. Lee, G. N. Parkinson, P. Hazel, and S. Neidle, “Observation of the coexistence of sodium and calcium ions in a DNA G-quadruplex ion channel,” *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 129, no. 33, pp. 10106–10107, 2007.
- [10] Y.-L. Wu *et al.*, “G-quadruplex organic frameworks,” *Nat. Chem.*, vol. 9, no. 5, pp. 466–472, 2017.

## Г. Научни радови публиковани из резултата докторске дисертације

Из резултата докторске дисертације кандидата **маст. физ.-хем. Бранислава Миловановића** објављено је **шест научних радова** и **три саопштења са научних скупова: три рада** у врхунским међународним часописима (**M<sub>21</sub>**), **два рада** у истакнутим међународним часописима (**M<sub>22</sub>**) и **један рад** у међународном часопису (**M<sub>23</sub>**). Сва **три саопштења са научних скупова** су са међународних скупова штампана у књигама радова у облику кратког извода (**M<sub>34</sub>**). Кандидат је први аутор на пет радова и други аутор на једном раду, као и први аутор на сва три научна саопштења.

### Радови у врхунским међународним часописима (**M<sub>21</sub>**):

Branislav Milovanović, Mihajlo Etinski, Igor Popov, Self-Assembly of Rylene-Decorated Guanine Ribbons on Graphene Surface for Optoelectronic Applications: A Theoretical Study, *Nanotechnology*, **2021**, 32 (43), pp 435405.

<https://doi.org/10.1088/1361-6528/ac162c>

IF(2020) 3,874

Branislav Milovanović, Milena Petković, Mihajlo Etinski, Alkaline Earth Cations Binding Mode Tailors Excited-State Charge Transfer Properties of Guanine Quadruplex: A TDDFT Study, *Spectrochim. Acta A*, **2022**, 267 (Part 2), pp 120584.

<https://doi.org/10.1016/j.saa.2021.120584>

IF(2020) 4,098

Ana Stanojević, Branislav Milovanović, Ivana M. Stanković, Mihajlo Etinski, Milena Petković, The Significance of the Metal Cation in Guanine-Quartet – Metalloporphyrin Complexes, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2021**, 23, pp 574-584.



**Радови у истакнутим међународним часописима (M<sub>22</sub>):**

Branislav Milovanović, Ivana M. Stanković, Milena Petković, Mihajlo Etinski, Modulating Excited Charge Transfer States of G-Quartet Self-Assemblies by Earth Alkaline Cations and Hydration, *J. Phys. Chem. A*, **2020**, 124 (40), pp 8101-8111.

<https://doi.org/10.1021/acs.jpca.0c05022>

IF(2020) 2,781

Branislav Milovanović, Milena Petković, Mihajlo Etinski, Igor Popov, Water-Mediated Interactions Enhance Alkaline Earth Cation Chelation in Neighboring Cavities of a Cytosine Quartet in the DNA Quadruplex, *J. Phys. Chem. B*, **2021**, 125 (43), pp 11996-12005.

<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.1c05598>

IF(2020) 2,991

**Радови у међународним часописима (M<sub>23</sub>):**

Branislav Milovanović, Milena Petković, Mihajlo Etinski, Properties of the Excited Electronic States of Guanine Quartet Complexes with Alkali Metal Cations, *J. Serb. Chem. Soc.*, **2020**, 85 (8), pp 1021-1032.

<https://doi.org/10.2298/JSC191025140M>

IF(2020) 1,240

**Научна саопштења на међународним скуповима штампана у књигама радова у облику кратког извода (M<sub>24</sub>):**

Branislav Milovanović, Milena Petković, Mihajlo Etinski, Significant Modulation of Charge-transfer States Properties in the Biological Assembly of the d(TG4T) Sequence in Crystal Form, *Nineteenth Young Researchers' Conference - Materials Science and Engineering*, pp 46, Book of Abstracts ISBN 978-86-80321-36-3, Belgrade, Serbia, December 1-3, **2021**.

Branislav Milovanović, Milena Petković, Mihajlo Etinski, Alkali Metal Cations Impact on the Excited States Properties of the Guanine Quartet, *11th Symposium on Computing  $\pi$ -Conjugated Compounds*, pp 42, Book of Abstracts (<https://cpic-society.com/>), Zagreb, Croatia, January 30 – February 1, **2020**.

Branislav Milovanović, Ivana M. Stanković, Milena Petković, Mihajlo Etinski, Tuning Charge Transfer States in the G-octet-metal Ion Complexes for the Potential Nanotechnological Applications, *Eighteenth Young Researchers' Conference - Materials Science and Engineering*, pp 25, Book of Abstracts ISBN 978-86-80321-35-6, Belgrade, Serbia, December 4-6, **2019**.

**Д. Провера оригиналности докторске дисертације**

## **Ђ. Закључак комисије**

На основу изложеног, Комисија закључује да резултати кандидата Бранислава Миловановића, приказани у оквиру докторске дисертације представљају оригиналан и значајан допринос области физичке хемије. Комисија позитивно оцењује докторску дисертацију кандидата Бранислава Миловановића, под насловом:

### **„Квантнохемијско проучавање супрамолекулских структура гуанина“**

и предлаже Наставно-научном већу Факултета за физичку хемију Универзитета у Београду да докторску дисертацију прихвати и одобри њену јавну одбрану, чиме би били испуњени услови да кандидат стекне звање доктор физичкохемијских наука.

У Београду, 02.02.2022.

**Комисија**

---

др Милена Петковић, редовни професор,  
Универзитет у Београду – Факултет за физичку хемију

---

др Мирослав Ристић, доцент,  
Универзитет у Београду – Факултет за физичку хемију

---

др Ивана Станковић, виши научни сарадник,  
Универзитет у Београду, Институт за хемију, технологију и металургију