

Фонд за науку Републике Србије
Програм ИДЕЈЕ

Физичкохемијски аспекти ритмичности
НеуроЕндокриних Система:
Динамичка и кинетичка истраживања
реакционих мрежа и главних једињења
која леже у њиховој основи
(НЕС)

Уводни састанак
Књига апстраката

Април, 2022.
Београд, Србија

Фонд за науку Републике Србије
Програм ИДЕЈЕ

Физичкохемијски аспекти ритмичности
НеуроЕндокриних Система:
Динамичка и кинетичка истраживања
реакционих мрежа и главних једињења
која леже у њиховој основи
(НЕС)

Уводни састанак
Књига апстраката

Април, 2022.
Београд, Србија

Учесници:

Универзитет у Београду – Институт за хемију, технологију и металургију,
Институт од Националног значаја за Републику Србију (ИХТМ)
Жељко Чупић (руководилац), **Ана Ивановић-Шашић**

Универзитет у Београду – Факултет за физичку хемију (ФФХ)
Љиљана Колар-Анић, Стеван Маћешкић, Јелена Цвијовић

Универзитет у Крагујевцу – Факултет медицинских наука (УКГФМН)
Недељко Манојловић, Мирослав Соврић, Александар Кочовић, Јовица Томовић

Институт за општу и физичку хемију, Београд (ИОФХ)
Александра Стојиљковић

Каролинска Институт – Одељење за клиничке неуронауке, Стокхолм, Шведска
Department of Clinical Neuroscience, Stockholm, Sweden (КИ)
Владана Вукојевић

Овај зборник апстраката са уводног састанка пројекта НЕС је сачињен уз финансијску подршку Фонда за науку Републике Србије.

За садржину ове публикације искључиво је одговоран Универзитет у Београду,
Институт за хемију, технологију и металургију,
Институт од националног значаја за Републику Србију, и та садржина не
изражава ставове Фонда за науку Републике Србије.

БИОГРАФИЈЕ УЧЕСНИКА

Др Владана Вукојевић је студије физичке хемије завршила 1989. године на Факултету за физичку хемију Универзитета у Београду. По завршетку студија, боравила је две године (1990, 1991) у својству гостујућег истраживача на Одсеку за физичку хемију (Kem. Lab III), Н. К. Ersted Institut (Н.С. Ørsted Institutet), Универзитет у Копенхагену, Данска. Магистарски рад је одбранила 1993. године, а докторску тезу 2000. године на Факултету за физичку хемију Универзитета у Београду. Постдокторске студије је завршила на Одсеку за клиничке неуронауке, Медицинског универзитета Каролинска Институт, Штокхолм, Шведска (2003-2006).

У звању асистента била је запослена на Факултету за физичку хемију Универзитета у Београду (1992-2001, 100 % радног времена) и на Факултету за фармацију Универзитета у Београду (1992-1999, 30 % радног времена). У звање доцент за предмет Биофизичка хемија изабрана је 2001. године на Факултету за физичку хемију Универзитета у Београду. 2011. године је изабрана у звање ванредни професор биохемије на Одсеку за клиничке неуронауке, Медицинског универзитета Каролинска Институт, Штокхолм, Шведска. Исте године је изабрана у звање гостујући професор Универзитета у Београду. Од 2016. године учествује у својству гостујућег предавача у раду Hokkaido Summer Institute (HSI), Хокаидо универзитета у Сапору, Јапан. Др Владана Вукојевић води на Одсеку за клиничке неуронауке, Медицинског Универзитета Каролинска Институт, Штокхолм своју истраживачку групу (<https://ki.se/en/cns/vladana-vukojevics-research-group>).

Др Владана Вукојевић је свој истраживачки рад, иницијално посвећен испитивању динамике и механизма нелинеарних хемијских система, усмерила ка истраживању сложених физичкохемијских процеса у биолошким системима. Објавила је 97 научних радова и одржала преко 30 предавања по позиву/усмених излагања на међународним скуповима. Према бази Web of Science, др Владана Вукојевић има вредност х-индекса 26 и укупан број цитата >1550. Према бази GoogleScholar Др Владана Вукојевић има вредност х-индекса 28 и укупан број цитата 2213 (у последњих 5 година, од 2017: х-индекс 18 и укупан број цитата 941). Комплетна листа публикација у бази PubMed: <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/myncbi/1FY3gfCGY-Cku/bibliography/public/>

Др Ана Ивановић-Шашић рођена је 25.04.1980. године у Шапцу, где је завршила основну и средњу школу. Дипломирала је 2004. године на Факултету за физичку хемију, Универзитета у Београду са просечном оценом током студија 9,35. На последипломске студије се уписала 2004/2005. Магистарску тезу под насловом „Примена мултиваријационе методе у реконструкцији атрактора и у анализи физичко-хемијских фактора загађења атмосфере” је одбранила 06.07.2007. године на Факултету за физичку хемију у Београду. Докторску дисертацију под насловом „Развој метода за квантификацију хаоса у нелинеарним реакционим системима” је одбранила 05.03.2010. године на Факултету за физичку хемију у Београду. У Институту за Нуклеарне науке „Винча” била је запослена од 01.12.2004 - 30.04.2006 године. У Институту за хемију, технологију и металургију - Центар за катализу и хемијско инжењерство запослена је од 01.05.2006. године. У звање виши научни сарадник изабрана је 2015. године а реизабрана 2021 године. Др Ана Ивановић-Шашић у континуитету до данас учествовала је у раду на пројектима основних истраживања и интегралним интердисциплинарним истраживањима које је финансирало надлежно министарство. До 31.12.2019. је била ангажована на пројекту ИИИ 45001 „Наноструктурни функционални и композитни материјали у каталитичким и сорпционим процесима“ и пројекту 172015 „Динамика нелинеарних физикохемијских и биолошких система са моделирањем и предвиђањем њихових понашања под неравнотежним условима“ који су финансирани од Министарства просвете, науке и технолошког развоја. У оквиру пројекта 172015 руководила је пројектним задатком „Развој и примена метода за квантификацију динамичких стања сложених нелинеарних физикохемијских и биохемијских система“. Активно је учествовала у изради докторских дисертација Владимира Марковића, Стевана Благојевића и Итане Нуше Бубање, које су произашле из овог потпројекта.

Рецензирала је радове у међународним часописима, радове са међународних конференција, као и две монографије, док је на позив Министарства просвете, науке и технолошког развоја била ангажована као рецензент једног предлога пројекта билатералне сарадње.

До сада је публиковала 2 поглавља у монографији, 26 радова у часописима међународног значаја (категорија М20). На научним скуповима међународног значаја саопштила је 17 радова који су штампани у целини, док је 27 радова штампано у изводу. На скуповима националног значаја објавила је 5 радова штампаних у изводу. Радови др Ане Ивановић-Шашић цитирани су 107 пута без аутоцитата (према бази SCOPUS), при чему Хиршов индекс износи 7.

Др Љиљана Колар-Анић рођена је 22.08.1947. године у Вировитици. Завршила је основну школу „Светозар Милетић“ у Земуну и Прву београдску гимназију у Београду. Природно-математички факултет, ПМФ, (Група за физичку хемију, данас Факултет за физичку хемију) Универзитета у Београду, уписала је 1966. године, а дипломирала у јулу 1970. године одбравивши рад под називом „Адсорпционе карактеристике модификованих површина алуминијумоксида“. Исте године уписује последипломске студије из физичке хемије на ПМФ-у у Београду. Магистарски рад под називом „Математичка анализа кинетике сложених хемијских реакција“ одбранила је јуна 1974, а докторат под називом „Једначина стања реалног гаса у гравитационом пољу“ јуна 1978. године. Од дипломирања, па до пензије непрекидно је радила на матичном факултету, а потом је, као научни саветник, била запослена на Институту за хемију, технологију и металургију Универзитета у Београду (2013-2014).

Изабрана је за асистента марта 1971. године на Катедри за физичку хемију ПМФ-а Универзитета у Београду. Почетком 1980. године је изабрана за научног сарадника за област Статистичка термодинамика и Неравнотежна термодинамика, на ПМФ-у, ООУР Одсеку за хемијске и физичкохемијске науке. У пролеће 1984, у истој радној организацији, изабрана је за доцента за предмете Статистичка термодинамика и Хемијска реактивност. У јануару 1991. године је изабрана у звање ванредни професор за предмете Статистичка термодинамика и Неравнотежни процеси, на ПМФ ОУР Факултет за физичку хемију. У јуну 1996. године је изабрана у звање редовни професор на Факултету за физичку хемију. За научног саветника је изабрана 2008. године у Институту за хемију, технологију и металургију (ИХТМ-у). 10. маја 2017. године на предлог Факултета за физичку хемију изабрана је у звање *professor emeritus* Универзитета у Београду.

У периоду од октобра 1978. до октобра 1979, била је на постдокторским студија-ма из теоријске физичке хемије на Слободном универзитету у Бриселу (Universite Libre de Bruxelles) на Департману за теоријску физичку хемију (Service de Chimie Physique II) којим тада руководи проф. I. Prigogine (добитник Нобелове награде за хемију 1977, за објашњење самоорганизовања нелинеарних система када се налазе у стањима далеко од равнотеже, појаве која се до тада сматрала термодинамички немогућом).

За допринос у развоју нелинеарних наука, изабрана је 2013 године за члана Јужнословенске академије нелинеарних наука.

Др Љиљана Колар-Анић је била ментор: 10 одбрањених докторских дисертација, 14 одбрањених магистарских радова, 6 мастер радова и 49 дипломских радова. Све докторске дисертације, магистарски и мастер радови су одбрањени на Универзитету у Београду.

На Факултету за физичку хемију држала је наставу на основним, последипломским, мастер и докторским академским студијама из више предмета, од њега су најважнији Статистичка термодинамика, Хемијска реактивност, Динамика нелинеарних процеса, Неравнотежна термодинамика, Биофизичка хемија и самоорганизација неравнотежних система, Моделирање и симулација сложених процеса и Осцилаторни процеси у хемијским, физичкохемијским и биолошким системима.

Научно-истраживачки рад проф. Љиљане Колар-Анић обухвата неколико истраживачких области: адсорпционо-десорпциони процеси, стање реалног гаса, кинетика нуклеације, кинетика хетерогених процеса, самоорганизовање система удаљених од термодинамичке

равнотеже, динамичка стања неуроендокриног хипоталамо-хипофизно-адреналног система, биохемијски процеси.

У досадашњем раду проф. Љиљана Колар-Анић објавила је 2 уџбеника (Ljiljana Kolar-Anić, *Osnove statističke termodinamike* и Ljiljana Kolar-Anić, Željko Čupić, Vladana Vukojević, Slobodan Anić, *Dinamika nelinearnih procesa*) затим 1 монографију, 6 радова монографског карактера категорије M10, 115 научних радова категорије M20, и више радова штампаних у целости у домаћим часописима, као и у просидингсима конференција.

Проф. Љиљана Колар-Анић је учествовала у реализацији 7 међународних и 13 националних пројеката. Била је руководиоца 6 међународних и 5 националних пројеката, међу којима и пројекта ОИ-172015 - *Динамика нелинеарних физичкохемијских и биохемијских система са моделирањем и предвиђањем њихових понашања под неравнотежним условима*" (Министарство просвете и науке РС 2011-2020).

Александар Кочовић је рођен 31.08.1991. године у Крагујевцу. Основну школу и средњу медицинску школу завршио је у Крагујевцу као носилац дипломе „Вук Караџић“ и ђак генерације. У јулу 2015. године дипломирао је на Интегрисаним академским студијама фармације, Факултета медицинских наука, Универзитета у Крагујевцу са просеком 9,90 стекао звање магистра фармације. Школске 2015/2016 године уписао је докторске академске студије на Факултету медицинских наука, Универзитета у Крагујевцу. Тренутно је студент треће године докторских академских студија на изборном подручју Клиничка и експериментална фармакологија. Положио је све испите предвиђене програмом докторских академских студија и усмени докторски испит са оценом 10. Докторска дисертација „Екстракти лишаја *Xanthoparmelia stenophylla*: фитохемијска анализа, биолошка активност и потенцијални кардиопротективни ефекти на моделу доксорубицином изазване кардиотоксичности“ под менторством проф. др Недељка Манојловића и доц. др Јоване Јеремић је тренутно у процедури израде. Од јануара 2017. године запослен је на Факултету медицинских наука Универзитета у Крагујевцу најпре као сарадник, а од априла 2019. године и као асистент за ужу научну област Фармацеутска анализа. Активно учествује у процесу извођења наставе на предметима у оквиру уже научне области. Од јула 2018. године ангажован је као истраживач на пројекту Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије број ОИ 172015 под називом „Динамика нелинеарних физичко-хемијских и биохемијских система са моделирањем и предвиђањем њихових понашања под неравнотежним условима“. Од 2015. године се активно бави научно-истраживачким радом. Аутор је и коаутор 9 радова у часописима од међународног значаја (категорија М20), при чему кумулативни импакт фактор износи 20,063 и 10 радова у часописима од националног значаја (категорија М50). Аутор је и коаутор 7 радова презентованих на научним скуповима од међународног значаја (М30) и 5 радова на научним скуповима од националног значаја (М60) који су публиковани у изводу. Радови асс. Александра Кочовића цитирани су 19 пута без аутоцитата (према бази SCOPUS), при чему Хиршов индекс износи 3. Рецензент је већег броја радова у научним часописима од међународног и националног значаја. Завршио је курс из области Истраживачка етика (Research Ethics) у организацији Icahn School of Medicine at Mount Sinai, New York, USA. Одлично чита, пише и говори енглески језик и познаје рад на рачунару.

Др Јелена Максимовић рођена је 20.08.1981. године у Пожеги, где је завршила основну и средњу школу. Дипломирала је 2006. године на Факултету за физичку хемију, Универзитета у Београду. Дипломске-мастер студије на Факултету за физичку хемију, Универзитета у Београду завршила је 2007. године. Тема дипломског-мастер рада била је „Карактеризација структуре и активности катализатора кобалта на полимерном носачу”. Докторску дисертацију под насловом „Утицај кобалта нанетог на кополимер поли-4-винилпиридин и дивинилбензен на осцилаторну еволуцију реакције Бреј-Лиџафски” је одбранила 29.09.2017. године на Факултету за физичку хемију, Универзитета у Београду. На Факултету за физичку хемију, Универзитета у Београду је запослена од 01.09.2006. године преко Пројекта кога је финансирало Министарство просвете, науке и технолошког развоја и то:

1. „Физичка хемија динамичких стања и структура неравнотежних система-од монотоне до осцилаторне еволуције и хаоса”, бр. 142025, руководилац др Љиљана Колар-Анић (01.09.2006.-31.12.2010.)
2. „Динамика нелинеарних физичкохемијских и биохемијских система са моделирањем и предвиђањем њихових понашања под неравнотежним условима”, бр. 172015, руководилац др Љиљана Колар-Анић (01.01.2011.-31.12.2019.).

У звање научни сарадник изабрана је 26.09.2018. године.

Досадашња истраживања др Јелене Максимовић спадају у област хемијске кинетике и динамике нелинеарних процеса. Резултати досадашњег научно-истраживачког рада припадају групи експерименталних радова и обухватају: један рад у међународном часопису изузетних вредности (M21a), 3 рада у врхунским међународним часописима (M21), 10 радова у истакнутим међународним часописима (M22), 10 радова у међународним часописима (M23), 27 саопштења на научним скуповима међународног значаја категорије M33 и 28 саопштења категорије M34. Има 1 рад у домаћем часопису и 3 саопштења на скуповима националног значаја. Њени радови цитирани су 110 пута без аутоцитата (према бази Scopus) и има Хиршов индекс 7.

Др Јелена Максимовић активно је учествовала у изради 3 мастер рада, (при чему је ментор једног мастер рада, а на два је радни ментор) одбрањених на Факултету за физичку хемију, Универзитета у Београду. Такође, др Јелена Максимовић је активно учествовала у свим фазама великог броја дипломских радова одбрањених на Факултету за физичку хемију, Универзитета у Београду, од поставке експеримената, преко представљања и обраде резултата, до дискусије резултата. Учествовала је и у популаризацији науке у Србији у оквиру различитих фестивала, тако што је поставила и демонстрирала више експерименталних вежби.

Др Јелена Максимовић је удата и мајка је двоје деце.

Проф. др Недељко Манојловић, редовни професор, рођен је 24.04.1966. године, у Краљеву, где је завршио основну и средњу школу. Дипломирао је на ПМФ у Крагујевцу, на смеру хемија, на коме је магистрирао и докторирао. Магистарску тезу под називом „Физиолошка активност синтетичких γ - и δ -лактона у функцији њихове хемијске структуре“ одбранио је 1995. године, а докторску дисертацију под називом „Изоловање природних антрахинона и њихових деривата као потенцијалних антибактеријских и антифунгалних супстанци“ одбранио је 2002. године. Од 1992. године до 2006. године био је запослен на ПМФ у Крагујевцу, а од 2006. године на Факултету медицинских наука у Крагујевцу где се тренутно налази на радном месту наставника у звању редовног професора и шефа катедре за ужу научну област Фармацеутска анализа. Био је 6 месеци на постдокторском усавршавању на Фармацеутском факултету, Махидол Универзитета у Бангкоку, на Тајланду (2006-07. год.). Добитник је стипендије Министарства за НЗЖС Р. Србије као један од 20 најбољих доктора наука у Србији (2006). Одржао је више предавања по позиву на *Каиро Универзитету у Египту*, *Махидол Универзитету на Тајланду*, *Аристотеловом Универзитету у Грчкој* и *Фармацеутском факултету у Брну у Чешкој*. Био је ментор 3 специјалистичка рада, 3 докторске дисертације, неколико мастер радова и великог броја дипломских радова. Осим наведених институција, остварује научну сарадњу и посету следећим институцијама: *Institute of pharmacognosy, University of Graz, (Austria)*, *Centro de Quimica Estrutural, Complexo I, Sapiencia University, Roma, (Italy)*, *Université Cadi Ayyad, Faculté des Sciences Semlalia, Marrakesh, (Morocco)* и *University Hassan II of Casablanca (Morocco)*. Публиковао је 53 научна рада у еминентним међународним часописима са SCI листе (M20), 6 радова категорије M50, 21 рад категорије M30, 6 радова категорије M60. Радови проф. др Недељка Манојловића цитирани су 909 пута без аутоцитата (према бази SCOPUS), при чему Хиршов индекс износи 18. Рецензирао је велики број радова у међународним и домаћим часописима. Учествовао је на великом броју међународних и домаћих конференција (преко 40). Поседује лиценцу предавача и руководиоца је обуке за Саветника за хемикалије, а такође је био руководиоца и предавач на курсу континуиране медицинске едукације. Написао је дав универзитетска уџбеника, четири практикума и две збирке задатака за студенте. Коаутор је једне монографије. Учествовао је на два пројекта Министарства науке под руководством проф. др Љиљане Колар-Анић: „Физичка хемија динамичких стања и структура неравнотежних система – од монотоне до осцилаторне еволуције и хаоса (172025Г)“ и „Динамика нелинеарних физичко хемијских и биолошких система са моделирањем и предвиђањем њихових понашања под неравнотеженим условима“ (172015). Био је руководиоца 2 јуниор пројекта: „Испитивање хемијског састава и антиоксидантне активности лековитих биљних врста *Hipporhae rhamnoides*, *Daphne oleoides* и *Thamnia vernicularis*“ (ЈП 05/08) и „Испитивање хемијског састава, антимицробне, антиоксидантне и цитотоксичне активности лековитих биљних врста рода *Daphne*“ (ЈП 06/11). Тренутно је учесник на пројекта Фонда за науку Републике Србије (7743504): „*Physicochemical aspects of rhythmicity in neuroendocrine systems: Dynamic and kinetic investigations of underlying reaction networks and their main compounds*“ (NES). Био је члан уредништва неколико часописа националног и међународног значаја. Чита, пише и говори енглески језик. Ожењен је супругом Иваном и отац је ћерке Ање и сина Томислава.

Др Стеван Р. Маћешкић рођен је 09.01.1985. године у Београду. Факултет за физичку хемију Универзитета у Београду, завршио је 2010. године са просечном оценом 9,30. Докторске студије на Факултету за физичку хемију уписао је школске 2010/2011 године. Завршио их је са просечном оценом 10,00 (десет), и одбранио 05. 12. 2014. године докторску дисертацију под називом „**Развој метода за испитивање стабилности неравнотежних стационарних стања сложених реакционих система**”, ментори др Љиљана Колар-Анић, професор емеритус, и др Жељко Чупић, научни саветник.

Запослен је на Факултету за физичку хемију Универзитета у Београду од марта 2011. године, на пројекту Министарства просвете, науке и технолошког развоја, бр. [172015](#), под називом „*Динамика нелинеарних физичкохемијских и биохемијских система са моделирањем и предвиђањем њихових понашања под неравнотежним условима*” (руководилац др Љиљана Колар-Анић, професор емеритус) као виши научни сарадник. Од фебруара 2022. Године учествује на пројекту „у оквиру програма ИДЕЈЕ. У периоду 2016-2019. године био је учесник на пројекту *EPSRC Healthcare Technologies Impact Fellowships EP/N033655/1 "Personalised Pulsatile Materials (PPM)"*, под руководством проф. Катарине Новаковић са Њукасл универзитета у Уједињеном Краљевству. У оквиру наведеног пројекта боравио је у периоду од 4 недеље током октобра 2017. године на Факултету за инжињерство Њукасл универзитета (School of Engineering, Newcastle University) у Уједињеном Краљевству. Био је руководилац билатералног пројекта „**Моделирање појединих осциларотних система у хемији, физичкој хемији и биологији**” у периоду од 2018. до 2019. године. У оквиру пројекта успостаљена је сарадња са Факултетом за природне науке и математику, Универзитета у Марибору. У периоду од 2018-2020. године био је на постдокторским студијама на Универзитету у Сегедину, Одсек за физичку хемију и материјале (University of Szeged, Department of Physical Chemistry and Material Science) под менторством проф. др Деже Хорвата и проф. др Аготе Тот.

Др Мирослав Соврлић је рођен 10.03.1987. године у Косовској Митровици. По завршетку основне школе, завршава средњу медицинску школу а потом уписује Медицински факултет у Крагујевцу. Дипломирао је 2005. године на Медицинском факултету Универзитета у Крагујевцу са просечном оценом током студија 9,32. Три пута је добијао признања за изузетне успехе постигнуте на студијама. Докторске академске студије уписује 2005. године. Докторску дисертацију под називом „Испитивање антимицробне и антиоксидативне активности екстракта три одабране биљне врсте рода *Daphne*“ је одбранио 20.04.2016. године на Факултету медицинских наука Универзитета у Крагујевцу под менторством проф. др Недељка Манојловића и стекао академско звање доктор медицинских наука. Запослен је на Факултету медицинских наука у Крагујевцу од 2010. године. Биран је два пута за асисента, док се од 2016. године налази на радном месту наставника у звању доцента за ужу научну област Фармацеутска анализа (реизабран 2021. године). Активно учествује у реализацији наставе на Интегрисаним академским студијама фармације и руководиоца је предмета Основи фармакогнозије и фитотерапије који се слуша на трећој години студија. Био је учесник пројекта Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије (ОИ 172015) и два Јуниор пројекта Факултета медицинских наука (ЈП 06/11 и ЈП 06/17). Резултати научно-истраживачког рада публиковани су у 10 радова часописа категорије М20 чији кумулативни импакт фактор износи 16,722. У часописима категорије М50 публиковано је 5 радова. На научним скуповима међународног значаја (М30) саопштено је 14 радова који су публиковани у изводу. Доц. др Мирослав Соврлић је аутор практикума под називом „Основи фармакогнозије и фитотерапије-приручник за практичну наставу“ издавача Факултета медицинских наука Универзитета у Крагујевцу. Радови доц. др Мирослава Соврлића цитирани су 72 пута без аутоцитата (према бази SCOPUS), при чему Хиршов индекс износи 6. Активан је рецензент радова у више научних часописа, рецензирао је 2 научна пројекта а ангажован је и од стране Комисије за акредитацију и проверу квалитета у високом образовању као рецензент у поступцима акредитације високошколских установа и студијских програма. Ментор је више десетина мастер радова. Ожењен је супругом Анђелом са којом има сина Уроша и кћи Андреу.

Александра Стојиљковић је рођена 1986. године у Крагујевцу. Дипломски и мастер рад из научне области Физичка хемија - биофизичка хемија је одбранила на Факултету за физичку хемију, Универзитета у Београду. Од 2013. године је студент докторских академских студија на Факултету за физичку хемију Универзитета у Београду.

Од 2014. године је запослена на Институту за општу и физичку хемију а.д., као истраживач-приправник, а од 2015. године као истраживач-сарадник у оквиру Лабораторије за испитивање, истраживање и развој, са реизбором 2019. године. Била је ангажована на научном пројекту Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије бр. 172015, под називом „*Динамика нелинеарних физикохемијских и биохемијских система са моделирањем и предвиђањем њихових понашања под неравнотежним условима*“, у периоду од јуна 2014. до августа 2020. године, а чији је руководилац др Љиљана Колар-Анић, професор емеритус Факултета за физичку хемију Универзитета у Београду. Такође, од 2018.године је члан локалног извршног одбора међународне конференције „*International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry*“, у организацији Друштва физикохемичара Србије.

Др Јовица Томовић је рођен 20.01.1987 у Пећи. Интегрисане академске студије фармације на Медицинском факултету Универзитета у Крагујевцу уписао је 2005/2006. године, а дипломирао 2010. године. Докторске академске студије је уписао школске 2011/12. године на Факултету медицинских наука у Крагујевцу – изборно подручје: Клиничка и експериментална фармакологија. 2019. године одбранио је докторску дисертацију под називом “Испитивање антиоксидативне и антитуморске активности екстраката три одабране врсте лишајева *Cladonia subulata*, *Pleurosticta acetabulum* и *Physcia semipinnata*” под менторством проф. др Недељка Манојловића и стекао академско звање доктора медицинских наука. Од 2014. године је запослен на Факултету медицинских наука у Крагујевцу и тренутно се налази на радном месту сарадника у звању асистента са докторатом за ужу научну област Фармацеутска анализа. Од октобра 2018. године укључен је на пројекат Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије под називом „Динамика нелинеарних физичкохемијских и биохемијских система са моделирањем и предвиђањем њихових понашања под неравнотежним условима” ев.бр. ОИ 172015. Похађао је више акредитованих курсева континуиране едукације из области медицине и фармације. Завршио је приправнички стаж и положио стручни испит за здравствене раднике ВСС- Министарство здравља Републике Србије. Члан је српског хемијског друштва. Члан је редакције међународног часописа *Journal of Drug Design and Medicinal Chemistry*. Аутор је више научних радова који су објављени у врхунским међународним и домаћим часописима или презентовани на домаћим или међународним конференцијама. Активан је рецензент радова у више научних часописа.

Др Жељко Чупић је рођен 13. августа 1963. године у Београду, где је на Факултету за физичку хемију дипломирао 1989. године, магистрирао 1993. године а докторирао 1998. године одбранивши докторску тезу под насловом “Моделирање механизма осцилаторних каталитичких процеса са применом на реакцију разлагања водоникпероксида”.

Од 1990. године непрекидно ради у Институту за хемију, технологију и металургију (ИХТМ) - Центру за катализу и хемијско инжењерство, а од 2007 у звању научни саветник. Од 2010. до 2021. године обављао је функцију Председника Научног одбора ИХТМ а од 2021. године је Председник Научног већа ИХТМ.

Бави се истраживањима у области Нелинеарних наука и Катализе, а посебно моделирањем сложених процеса. Ближе, његова истраживања доминантно обухватају феноменологију и теорију самоорганизационих система и њихове динамике: хомогених осцилатора (Bray-Liebhaftsky и Белоусов-Жаботински) и биолошких осцилатора (Хипоталамо-хипофизно-адренални систем).

Објавио је низ радова, од тога 7 поглавља у међународним и 4 у домаћим монографијама, 23 рада у врхунским међународним часописима, 8 радова у истакнутим међународним часописима, 48 радова у међународним часописима, 12 радова у домаћим часописима, преко 120 саопштења на међународним и преко 30 на националним научним скуповима. Био је предавач по позиву на више научних скупова.

У периоду 2004-2005. године др Чупић је руководио националним Пројектом 1807 (Синтеза, карактеризација, тестирање и моделовање хетерогених катализатора за парцијалне и потпуне оксидације органских једињења), а у периоду 2006-2010. године и Пројектом 142019 (Синтеза, карактеризација и тестирање каталитичких својстава специјално дизајнираних материјала).

Током октобра 2013. године у оквиру билатералног пројекта је на Хемијском одељењу Универзитета у Болоњи у Италији одржао серију предавања под заједничким насловом “Non-linear phenomena in chemistry and their analytical applications”. Током фебруара и марта 2013. године боравио је и у Каролинска Институту у Штокхолму у Шведској захваљујући стипендији Фонда Рајко и Мај Ђермановић и том приликом реализовао је сарадњу са Проф. Владаном Вукојевић и проф Ларсом Теренијусом на моделирању утицаја алкохола на ендокрини систем. Сарадњу са овом групом наставио је кроз Еразмус+ програме.

Др Жељко Чупић је члан Председништва Друштва физикохемичара Србије (од 2003) а од 2014. године и Секретар Друштва. На међународним конференцијама Друштва физикохемичара Србије из фундаменталне и примењене физичке хемије Physical Chemistry био је члан Извршног комитета (2002, 2004 и 2006) и Подпредседник (2008) и Председник (2010 - 2021) Научног одбора. У јуну 2014. године додељено му је и признање Заслужни члан Друштва физикохемичара Србије. Крајем 2015. године изабран је и за члана Јужнословенске академије нелинеарних наука. За члана Научног друштва Србије је изабран 2016. године а од 2019. године обавља и функцију Секретара Одељења природно-математичких наука у овом удружењу. Од 2022. године је члан међународног Удружења за истраживање биолошких ритмова (Society for Research on Biological Rhythms).

У научном часопису Хемијска Индустрија Савеза хемијских инжењера Србије, др Ж. Чупић је члан Уредништва (од 2008-2022). Од 2016. године је члан уређивачког одбора и у часопису

Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis који издаје мађарска кућа Akadémiai Kiadó а штампа SpringerNature.

Др Ж. Чупић је ангажован на Факултету за физичку хемију Универзитета у Београду као предавач на докторским и мастер студијама и као ментор више од 10 докторских теза а такође и већег броја магистарских теза, дипломских мастер и семинарских радова. Коаутор је универзитетског уџбеника: Љ. Колар-Анић, Ж. Чупић, В. Вукојевић, С. Анић, Динамика нелинеарних процеса, Факултет за физичку хемију, Универзитет у Београду, 2011 (400 стр.)

АПСТРАКТИ

Моделирање ХПА осе и расплитање повратне спреге на рецепторима

¹Жељко Чупић, ²Љиљана Колар Анић, ²Стеван Маћешић, ¹Ана Ивановић-Шашић,
²Јелена Максимовић

¹Универзитет у Београду –Институт за хемију, технологију и металургију,
Институт од Националног значаја за Републику Србију
²Универзитет у Београду – Факултет за физичку хемију

ХПА оса је динамички неуроендокрини систем којег чине хипоталамус, хипофиза и кора надбубрежних жлезда. Сложена мрежа биохемијских реакција која омогућује функционисање овог система регулише нивое стероидних хормона (кортизола, кортикостерона, алдостерона и других) и пептидних хормона (кортикотропин-ослобађајући хормон (ЦРХ), адренкортикотропни хормон (АЦТХ) и других) у крвотоку. ХПА оса представља главни неуроендокрини систем код сисара који омогућује брзи одговор и одбрану од стреса, где се под стресом подразумева свака пертурбација.

Динамика ХПА осе је веома сложена. Под нормалним физиолошким условима, тзв. базалним условима, динамика ХПА осе је окарактерисана циркадијалним (дневним) ритмом, чији период износи око 24 сата; и ултрадијалним (унутардневним) ритмом лучења хормона, чији период може бити од 20 минута до 2 сата. Додатно, активност ХПА осе се повећава када је организам изложен стресу.

Неуроендокрини системи ће у пројекту НЕС бити посматрани у контексту физичкохемијских спрега које доводе до самоорганизационих феномена и различитих форми нелинеарне динамике. Њихове функције битне за регулацију функционисања организма као целине моделираћемо мрежама међусобно спрегнутих стехиометријских трансформација. Развој модела ћемо заснивати на експерименталним мерењима активности основних конституената ових система под условима одигравања неравнотежних процеса у осцилаторним реакцијама. За разлику од наших досадашњих истраживања у домену динамике ХПА осе на пројекту НЕС први пут ћемо радити на распрезању процеса који се одвијају на самим рецепторима. Већина фармацеутски активних супстанци које се користе за регулацију динамике овог подсистема делује управо преко интеракције са глукокортикоидним рецепторима, тако да је и адекватно моделирање њиховог дејства могуће једино ако модел укључује објашњење улоге рецептора.

Развој модела ХПА осе за анализу утицаја аргинин-вазопресина

¹Александра Стојиљковић, ²Љиљана Колар-Анић, ³Жељко Чутић,
³Ана Ивановић-Шашић, ²Стеван Маћешкић

¹Институт за општу и физичку хемију, Београд

²Универзитет у Београду – Факултет за физичку хемију

³Универзитет у Београду – Институт за хемију, технологију и металургију,
Институт од Националног значаја за Републику Србију

Истраживачка интересовања Александре Стојиљковић припадају областима Физичка хемија - биофизичка хемија и динамика неравнотежних процеса; и Физичка хемија – хемијска кинетика, из којих је у току израда докторске дисертације. Дисертација се бави теоријским испитивањем хипоталамо-хипофизно-надбубрежне (ХПА) (енг. НРА) осе, као дела неуроендокриног система, који је одговоран за одржавање хомеостазе организма при физиолошки нормалним, као и различитим стресним условима. Тачније, ради се на проширивању већ постојећег стехиометријског реакционог модела ХПА осе, како би се надоградио утицај аргинин-вазопресина, са посебним освртом на синергички утицај аргинин-вазопресина (АВП) (енг. AVP) и кортикотропин-ослобађајућег хормона (ЦРХ) (енг. CRH) на ХПА осу. Циљ истраживања је испитивање динамичких стања и активности ХПА осе човека насталих услед утицаја синергичког деловања АВП и ЦРХ у нормалним физиолошким условима, предвиђање понашања ХПА система под стресним условима, као и усклађивање резултата са литературним подацима. Како би се остварили циљеви спроводе се *in silico* експерименти над проширеним моделом у програмском пакету Матлаб (енг. MATLAB), примењује се бифуркациона анализа, односно анализира се појављивање и тип бифуркационих тачака, у којима промене динамичких стања јављају.

Од 2022. године је ангажована на пројекту НЕС, финансираног од стране Фонда за науку, унутар којег ће наставити са моделирањем ХПА система и испитивањем особина новог модела. Такође ће бити задужена за претраживање различитих база и литературе о неуроендокриним системима и нелинеарним повратним спрегама унутар њих. Осим тога, за време трајања пројекта НЕС, учествоваће у организацији међународне конференције и радионица.

Моделирање синтезе тироидних хормона

¹Љиљана Колар-Анић, ²Жељко Чупић, ¹Стеван Маћешић, ²Ана Ивановић-Шашић

¹Универзитет у Београду – Факултет за физичку хемију

*²Универзитет у Београду – Институт за хемију, технологију и металургију,
Институт од Националног значаја за Републику Србију*

Основни тироидни хормони су тироксин (Т4) и тријодотиронин (Т3). Они настају од тирозина и јода. Њихова синтеза се одвија у оквиру неуроендокриног система познатог под називом хипоталамо-хипофизно-тироидна (ХПТ) оса, или, само, тироидна оса. Наиме, из хипоталамуса се лучи тиротропин-ослобађајући хормон (ТРХ) који локалним крвотоком улази у предњи режањ хипофизе где ослобађа тиротропин, односно тироидни стимулишући хормон (ТСХ). ТСХ путем крвотока стиже до свог рецептора који се налази на епителном делу тироидних ћелија. Ту ослобађа низ својих сукцесора преко којих ТСХ утиче на све потпроцесе који се одвијају у тироидној жлезди, од синтезе тироглобулина, јодирања тирозина, спајања два по два тирозина у одговарајуће тироидне хормоне, па до њиховог опет компликованог преласка у крвоток. У тироидној жлезди настаје десет пута више тироксина него тријодотиронина. Већи део Т3 настаје процесом дејодинације Т4 углавном у јетри и бубрезима.

Наша истраживања су усмерена ка моделирању механизма синтезе тироидних хормона у циљу предвиђања и корекције различитих поремечаја основног (базалног) стања кроз избор одговарајућих лекова којима би се систем вратио из болесног у нормално стање. Дугорочно гледано, моделирање кинетике синтезе тироидних хормона би допринело лечењу пацијената оболелих од различитих болести које се односе на дисфункцију тироидних хормона и тироидне жлезде.

На моделирању механизма синтезе тироидних хормона из теоријског и нумеричког угла, до сада су радили горе наведени истраживачи.

Молекуларне основе болести зависности. Експериментална и теоријска испитивања улоге опиоидног система у настајању и лечењу зависности од алкохола

Владана Вукојевић

*Одсек за клиничке неуронауке, Центар за молекуларну медицину Каролинска институт,
Штокхолм, Шведска*

Према Дијагностичком и статистичком приручнику о менталним поремећајима (Diagnostic and Statistical Manual of Mental Disorders (DSM-5)), болести зависности од супстанци се дефинишу као поремећаји употребе супстанци упркос значајним штетним последицама које са собом носе. Зависност од алкохола је једна од најраспрострањенијих болести зависности од супстанци – процењује се да око 5. 1 % људи (283 милиона људи 2016 године) пати од поремећаја употребе алкохола док је број зависних од алкохола 2016 процењен на 144 милиона људи. Зависност од алкохола је до те мере уобичјена у готово свим земљама света да је Светска здравствена организација (World Health Organization (WHO)) донела Глобални акциони план за алкохол 2022-2030, како би поспешила имплементацију Глобалне стратегије за смањење штетних употреба алкохола [1]. Упркос неоспорној потреби и интензивним истраживачким напорима, још увек није у потпуности познато како алкохол (етанол) испољава своје психоактивно дејство и лекови за лечење поремећаја употребе алкохола још увек нису довољно развијени [2,3]. Један од неколико лекова (3 у Сједињеним Америчким Државама и 5 у Европској заједници) који је одобрен од стране америчке Управе за храну и лекове (Food and Drug Administration (FDA)) и од Европске агенције за лекове (European Medicines Agency (EMA)) за лечење поремећаја употребе алкохола је налтрексон, дугоделујући антагонист опиоидних рецептора који првенствено делује на ми- (μ)-опиоидне рецепторе [4]. На жалост, терапијско дејство и ефикасност налтрексона варирају значјно на индивидуалном нивоу [5] и придржавање терапији је ограничено [6], пре свега због нежељених дејстава који овај лек изазива на функцију ендогеног ми-опиоидног система који улази у састав неуроендокриног система, односно хипоталамусно-хипофизно-адrenalне (ХПА) осе.

Како бисмо боље разумели механизам деловања алкохола/налтрексона на ћелијском нивоу, моја група користи и даље развија технике конфокалне флуоресцентне микроскопије и корелационе спектроскопије [7-9] и адекватне ћелијске моделе [10]. То нам омогућава да у живим ћелијама квантитативно окарактеришемо ефекте које алкохол/налтрексон изазивају на примарном месту свог деловања, опиоидни рецептори и липиди у ћелијској плазма мембрани. Наша истраживања су показала да је латерална организација опиоидних рецептора, као и многих других рецептора из групе Г протеин-спрегнутих рецептора (eng. G protein-coupled receptors (GPCRs)), сложена и да у плазма мембрани живих ћелија постоји динамичка равнотежа између мономера опиоидних рецептора који слободно дифундују кроз липидни двослој плазма мембране и опиоидних рецептора који заједно са липидима и другим протеинима улазе у састав транзијентно формираних супрамолекуларних динамичких

структура обогачених холестеролом тзв. холестером обогачени липидни сплавови, чија величина варира од 10 нм – 200 нм [10]. Алкохол и налтрексон делују супротно на динамичку латералну организацију опиоидних рецептора, при чему алкохол „раствара“ холестером обогачене липидне сплавове и помера динамичку равнотежу у смеру формирања мономера, док налтрексон поспешује груписање опиоидних рецептора у холестером обогачене липидне сплавове [11]. На тај начин, алкохол/налтрексон суптилно утичу на динамичку регулацију сигнализације кроз опиоидне, а врло могуће и друге ГПЦРс [12], на ћелијском нивоу.

Осим на динамичку латералну организацију опиоидних рецептора, алкохол такође утиче на концентрацију β -ендорфина, пептида кој је ендогени лиганд ми-опиоидних рецептора. Овај пептид настаје протеолитичком деградацијом прохормона проопиомеланокортина, при чему такође настаје адренкортикотропни хормон (АЦТХ), нероендокрини хормон који је један од основних носилаца функције ХПА осе. Како бисмо на нивоу организма разумели како алкохол утиче на динамику ХПА осе, тесно сарађујем са колегама са Факултета за физичку хемију (ФФХ) и Института за хемију, технологију и металургију (ИХТМ) на математичком моделирању утицаја алкохола на динамику ХПА осе [13, 14], али и других облика стимулације [15].

Премда је распрострањено мишљење де је основни начин на који алкохол остварује свој утицај на функцију неуроендокриног система преко алкохом изазваног повишења концентрације β -ендорфина, тзв. хипотеза опиоидне индукције (у слободном преводу VV) или „opioid surfeit hypothesis“ [16], и да налтрексон делује на сузбијање зависности од алкохола тако што блокира везивање алкохом изазваног β -ендорфина за ми-опиоидне рецепторе [16], истраживања на анималним моделима показују да генетски нокаути опиоидних пептида, било да се ради о енкефалинима или ендорфинима, који су ендогени лиганди опиоидних рецептора, не показују очекиване промене у конзумацији алкохола [17-19], док генетски нокаути ми-опиоидних рецептора не конзумирају алкохол [20]. Такође, савремене технике конфокалне микроскопије показују да дуготрајно конзумирање алкохола утиче на промену густине ми-опиоидних рецептора у централном нервном систему (ЦНС) [21], што је довело до претпоставке да алкохом-изазвано транзијентно повећање густине ми-опиоидних рецептора може да изазове транзијентно активирање опиоидног система, изазивајући иницијално пријатна осећања, док су негативна осећања која су својствена дуготрајној употреби алкохола изазвана смањењем густине ми-опиоидних рецептора у ЦНС-у [21].

У склопу НЕС пројекта, следеће активности могу значајно да допринесу бољем разумевању улоге опиоидног система у настајању и лечењу зависности од алкохола:

(1) Математичко моделирање утицаја етанола на динамику ХПА осе код глодара

(2) Математичко моделирање утицаја налтрексона на динамику ХПА осе код људи и глодара

Литература

1. Global alcohol action plan 2022-2030 to strengthen implementation of the Global Strategy to Reduce the Harmful Use of Alcohol (https://cdn.who.int/media/docs/default-source/alcohol/alcohol-action-plan/ada-action-plan-on-alcohol_second-draft.pdf?sfvrsn=a994ba7a_3&download=true)

2. Kranzler HR, Soyka M. Diagnosis and Pharmacotherapy of Alcohol Use Disorder: A Review. *JAMA*. 2018 320(8): 815-824.
3. Swift RM, Aston ER. Pharmacotherapy for alcohol use disorder: current and emerging therapies. *Harv Rev Psychiatry*. 2015 23(2):122-133.
4. Singh D, Saadabadi A. Naltrexone. [Updated 2022 Feb 16]. In: StatPearls [Internet]. Treasure Island (FL): StatPearls Publishing; 2022 Jan-. Available from: <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/books/NBK534811/>
5. Dermody SS, Wardell JD, Stoner SA, Hendershot CS. Predictors of Daily Adherence to Naltrexone for Alcohol Use Disorder Treatment During a Mobile Health Intervention. *Ann Behav Med*. 2018 52(9): 787-797.
6. Dermody SS, Wardell JD, Stoner SA, Hendershot CS. Predictors of Daily Adherence to Naltrexone for Alcohol Use Disorder Treatment During a Mobile Health Intervention. *Ann Behav Med*. 2018;52(9):787-797.
7. Vukojević V, Heidkamp M, Ming Y, Johansson B, Terenius L, Rigler R. Quantitative single-molecule imaging by Confocal Laser Scanning Microscopy. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2008 105:18176-18181.
8. Krmpot AJ, Nikolić SN, Oasa S, Papadopoulos DK, Vitali M, Oura M, Mikuni S, Thyberg P, Tisa S, Kinjo M, Nilsson L, Terenius L, Rigler R, Vukojević V. Functional Fluorescence Microscopy Imaging: Quantitative Scanning-Free Confocal Fluorescence Microscopy for the Characterization of Fast Dynamic Processes in Live Cells. *Anal Chem*. 2019 91(17): 11129-11137.
9. Oasa S, Krmpot AJ, Nikolić SN, Clayton AHA, Tsigelny IF, Changeux JP, Terenius L, Rigler R, Vukojević V. Dynamic Cellular Cartography: Mapping the Local Determinants of Oligodendrocyte Transcription Factor 2 (OLIG2) Function in Live Cells Using Massively Parallel Fluorescence Correlation Spectroscopy Integrated with Fluorescence Lifetime Imaging Microscopy (mpFCS/FLIM). *Anal Chem*. 2021 93(35): 12011-12021.
10. Rogacki MK, Golfetto O, Tobin SJ, Li T, Biswas S, Jorand R, Zhang H, Radoi V, Ming Y, Svenningsson P, Ganjali D, Wakefield DL, Sideris A, Small AR, Terenius L, Jovanović-Talisman T, Vukojević V. Dynamic lateral organization of opioid receptors (κ , μ WT and μ N40D) in the plasma membrane at the nanoscale level. *Traffic* 2018 19(9): 690-709.
11. Tobin SJ, Wakefield DL, Terenius L, Vukojević V, Jovanović-Talisman T. Ethanol and Naltrexone Have Distinct Effects on the Lateral Nano-organization of μ and κ Opioid Receptors in the Plasma Membrane. *ACS Chem. Neurosci*. 2019 10(1): 667-676.
12. Tobin SJ, Cacao EE, Hong DW, Terenius L, Vukojević V, Jovanovic-Talisman T. Nanoscale Effects of Ethanol and Naltrexone on Protein Organization in the Plasma Membrane Studied by Photoactivated Localization Microscopy (PALM). *PLoS One*. 2014 9:e87225.
13. Čupić Ž, Stanojević A, Marković VM, Kolar-Anić L, Terenius L, Vukojević V. The HPA axis and ethanol: a synthesis of mathematical modelling and experimental observations. *Addict Biol*. 2017 22(6):1486-1500.
14. Stanojević A, Marković VM, Čupić Ž, Kolar-Anić L, Vukojević V. Advances in mathematical modelling of the hypothalamic–pituitary–adrenal (HPA) axis dynamics and the neuroendocrine response to stress. *Curr. Opin. Chem. Eng*. 2018 21: 84-95.
15. Abulseoud OA, Ho MC, Choi DS, Stanojević A, Čupić Ž, Kolar-Anić L, Vukojević V. Corticosterone oscillations during mania induction in the lateral hypothalamic kindled rat- Experimental observations and mathematical modeling. *PLoS One*. 2017 12(5):e0177551.

16. Froehlich JC, Li T-K, Opioid Peptides, pp. 187–205. In „Recent Developments in Alcoholism: Ten Years of Progress, Social and Cultural Perspectives Physiology and Biochemistry Clinical Pathology Trends in Treatment“ Ed. Galanter M. 2013 Volume 11, Springer Science + Business Media, LLC.
17. Koenig HN, Olive M Ethanol consumption patterns and conditioned place preference in mice lacking preproenkephalin. *Neurosci. Lett.* 2002 325: 75–78.
18. Griesel JE, Mogil JS, Grahame NJ, Rubinstein M, Belknap JK, et al. Ethanol oral self-administration is increased in mutant mice with decreased bendorphin expression. *Brain Res.* 1999 835: 62–67.
19. Grahame NJ, Low MJ, Cunningham CL. Intravenous self-administration of ethanol in beta-endorphin-deficient mice. *Alcohol Clin. Exp. Res.* 1998 22: 1093–1098.
20. Roberts AJ, McDonald JS, Heyser CJ, Kieffer BL, Matthes HW. mu-Opioid receptor knockout mice do not self-administer alcohol. *J. Pharmacol. Exp. Ther.* 2000 293: 1002–1008.
21. Saland LC, Hastings CM, Abeyta A, Chavez JB. Chronic ethanol modulates delta and mu-opioid receptor expression in rat CNS: immunohistochemical analysis with quantitative confocal microscopy. *Neurosci. Lett.* 2005 381: 163–168.

Експериментална истраживања у затвореном и отвореном реактору

¹Јелена Максимовић, ¹Љиљана Колар-Анић, ²Желько Чупић, ¹Стеван Маћешаћ,
²Ана Ивановић-Шашић

¹Универзитет у Београду – Факултет за физичку хемију

²Универзитет у Београду – Институт за хемију, технологију и металургију,
Институт од Националног значаја за Републику Србију

Др Јелена Максимовић је део Београдске групе која има вишегодишње искуство у области нелинеарне динамике, а нарочито у експерименталном истраживању хемијских осцилатора. Најзначајнији део експерименталног истраживања односи се на испитивање јодатних осцилатора Бреј-Лиџафски, Бригс-Раушер и њихових реакционих подсистема. Експериментална истраживања осцилаторних реакција реализују се како у условима затвореног, тако и у условима отвореног реактора. Иако су на први поглед једноставне, осцилаторне реакције су предмет интензивног испитивања дуги низ година и по експериментално примећеним феноменима чине један од динамички најбогатијих система. Оне су изузетно осетљиве на спољашње пертурбације, па се успешно користе за одређивање концентрације активног анализата, али и његове потенцијалне антиоксидативне/антирадикалске активности. Коришћење осцилаторних реакција као матрица за одређивање анализата, претпоставља оптимизацију експерименталних услова, тј. испитивање утицаја различитих независних параметара, као што су концентрације реактанта, температура, брзина мешања реакционог раствора, специфична брзина протока..., на динамику матричног система.

До сада је, помоћу осцилаторних реакција, испитан велики број анализата, а у наредном периоду планира се испитивање тирозина, тироглобулина, као и хормона штитне жлезде (тријодотиронина, тироксина и ТСХ).

Добијање екстраката из различитих биљних врста, идентификација њихових метаболита и испитивање њихове активности

Проф. др Недељко Манојловић, доц. др Мирослав Соврлић, др Јовица Томовић и Александар Кочовић

Универзитет у Крагујевцу – Факултет медицинских наука (УКГФМС)

Истраживачка група из Крагујевца коју чине проф. др Недељко Манојловића, доц. др Мирослав Соврлић, др Јовица Томовић и Александар Кочовић се бави добијањем различитих врста екстраката из виших биљака и лишајева, изоловањем чистих једињења из ових екстраката, њиховом идентификацијом и испитивањем њихове биолошке активности.

Главни фокуси научно-истраживачког рада ове истраживачке групе су подељени у више фаза и задатака. Први задатак је налажење и прикупљање биљног материјала, и њихова припрема за екстракцију. Након тога следи процес добијања биљних екстраката и етеричних уља (методе екстракције, оптимизације процеса екстракције, дестилација). Након добијања, прелиминарно се испитује њихова фитохемијска активност применом хроматографије на танком слоју - TLC. Након тога, за детаљнију анализу користи се инструментална хроматографска метода, HPLC-UV. Након фитохемијске анализе екстраката, приступа се изоловању потенцијалних биоактивних молекула применом хроматографије на колони. Изоловани секундарни метаболити биљака, пречишћавају се применом различитих метода. Прецизна идентификација хемијске структуре изолованих биомолекула изводи се применом спектроскопских метода (UV спектроскопија, IR спектроскопија, NMR спектроскопија и MS спектрометрија). Изолована и идентификована једињења се користе за испитивање њихове биолошке активности (антиоксидативна, антимицробна, цитостациона), при чему се врши поређење ове активности са одговарајућим активностима екстраката припремљених у различитим врстама растварача. Осим ових активности, истраживачи ове групе су се бавили и испитивањем интеракција природних једињења и конвенционалних лекова са протеинима плазме применом флуоресцентне, UV/Vis и инфрацрвене спектроскопије, циркуларног дихроизма и молекуларног докинга, анализом примарних и секундарних података применом метода основне и напредне биостатистике и хемометрије, истраживачком етиком и биоетиком. Као изузетно значајном показала се сарадња са међународним институцијама и универзитетима, при чему су као материјал коришћене врсте лишајева које расту у другим крајевима света (пре свега југоисточне Азије и северне Африке). Из ове сарадње произашло је седам научних радова са факултетима као што су: *Faculty of pharmacy, Mahidol university, Bangkok, Thailand, Faculty of sciences, Cairo University, Cairo, Egypt, Université Cadi Ayyad, Faculté des Sciences Semlalia, Marrakesh, (Morocco) u University Hassan II of Casablanca (Morocco)*.

Истраживачка група из Крагујевца, у наредном периоду, активно ће учествовати у делу задатака нашег пројекта, који се тичу изоловања ароматичне аминокиселине тирозина из различитих природних извора, као што су млеко и сир. Такође ћемо припремити екстракте и

изоловати чиста фенолна једињења из лишајева и виших биљака. Након пречишћевања и идентификације, ова једињења ће се користити у даљим фазама нашег пројекта.

Моделирање сложених реакционих система - Бреј Либхафски реакција

¹Стеван Маћешаић, ²Ана Ивановић-Шашић, ²Жељко Чупић, ¹Љиљана Колар Анић, ²Јелена Максимовић

¹Универзитет у Београду – Факултет за физичку хемију

²Универзитет у Београду –Институт за хемију, технологију и металургију,
Институт од Националног значаја за Републику Србију

Научноистраживачки рад др Стевана Маћешаића усмерен је ка истраживањима у области моделирања сложених нелинеарних реакционих процеса у биолошким и физичкохемијским системима под неравнотежним условима. Фокус научноистраживачке активности је ка експерименталном и теоријском испитивању и разоткривању механизма сложених хемијских и биолошких система као што су осцилаторне реакције *Bray-Liebhafsky* (БЛ), *Belousov-Zhabotinskii* (БЖ), оксидативна карбонилација у присуству полимерног супстрата са палладијумом као катализатором и хипоталамо-хипофизно-адrenalног система (ХПА, од енгл. *hypothalamic-pituitary-adrenal axis*). Применом метода као што су **анализа стехиометријских мрежа** (СНА) и метода нумеричке континуације и бифуркационе анализе др Стеван Маћешаић ради на разоткривању и бољем схватању механизма који доводе до појаве различитих облика динамике, као што су осцилаторна динамика и бистабилност, у моделима осцилаторних реакција БЛ, БЖ и ХПА осе. Својим радом допринео је постављању реалног модела ХПА осе и откривању услова који морају бити задовољени како би наведени систем могао да произведе одговарајућу осцилаторну динамику, која је од животне важности за биолошке системе. Такође је дао допринос и стварању реалистичног модела за осцилаторну карбонилацију у присуству полимерног супстрата и анализи истог. Посебан значај модела осцилаторне карбонилације огледа се у примени наведеног система као основа за развој полимерних система на бази осцилаторних реакција чија је основна функција дистрибуција лекова у организам која је усклађена са ћелијским циклусима и људским биоритмовима. Поред тога ради и на усавршавању наведених метода, што се првенствено огледа у развоју ефикасних програма који омогућавају њихову примену на реалним системима који имају велики број реакционих врста и реакција.

У оквиру пројекта бавиће се решавањем проблема распрезања позитивне и негативне повратне спреге у већ постављеном моделу хипоталамо-хипофизно-адrenalне (ХПА) осе, као и креирањем и оптимизацијом модела хипофизно-адrenalно-тироидне осе.

Теоријска обрада резултата укључујући симулације реакција

¹Ана Ивановић-Шашић, ¹Жељко Чупић, ²Стеван Маћешић, ²Љиљана Колар Анић, ²Јелена Максимовић, ³Александра Стојиљковић

¹Универзитет у Београду –Институт за хемију, технологију и металургију,
Институт од Националног значаја за Републику Србију
²Универзитет у Београду – Факултет за физичку хемију
³Институт за општу и физичку хемију, Београд

Др Ана Ивановић-Шашић је део Београдске групе која има вишегодишње искуство у области нелинеарне динамике реакционих система. Од 2006. године, када је запослена у Центру за катализу и хемијско инжењерство, бави се нумеричком квантификацијом експерименталних резултата из пертурбованих система. Применом различитих квалитативних и вантитативних метода анализира фину структуру сложених динамичких стања. Осим тога, бави се и квантитативном анализом експериментално добијеног интермитентног хаоса у Бреј Лиџафски (БЛ) осцилаторној реакцији при различитим контролним параметрима. Поред тога у наредном периоду наставиће рад на БЛ систему и његовом моделирању са посебним акцентом на квантификацију нумерички добијених интермитентних стања.

Као заменик председника извршног одбора, учествовала је у организацији више међународних конференција и током НЕС пројекта биће укључена у све фазе организације научних конференција и скупова, као руководилац потпројекта.

Поред тога, активно ће учествовати на унапређењу експерименталних и теоријских метода за стехиометријско моделовање новог ХПТ (енг. НРТ) модела. Радиће на избору најважнијих реакционих врста и реакција између њих. Применом постојећих и развојем нових метода квантификације, анализираће добијене комплексне феномене као што су осцилације мешаних модела и детерминистички хаос. Поред тога, наставиће рад на испитивању динамике ХПА (енг. НРА) система под стресним условима. Осим тога, испитиваће динамичка стања настала проширивањем постојећег модела ХПА осе са циљем што бољег слагања добијених резултата са постојећим литерарним.

