

## Научном већу Института за физику у Београду

**Предмет: Молба за покретање поступка за реизбор у звање научни сарадник**

С обзиром на то да испуњавам критеријуме прописане од стране Министарства науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије за звање научни сарадник, молим Научно веће Института за физику у Београду да покрене поступак за мој реизбор у наведено звање.

У прилогу достављам:

1. Мишљење руководиоца лабораторије са предлогом чланова комисије за реизбор у наведено звање;
2. Стручну биографију;
3. Преглед научне активности;
4. Елементе за квалитативну и квантитативну оцену научног доприноса;
5. Списак и фотокопије објављених научних радова и других публикација разврстан по важећим категоријама прописаним од стране Министарства науке, технолошког развоја и иновација;
6. Податке о цитираности;
7. Фотокопију решења о претходном избору у звање;
8. Додатне прилоге који документују наводе;

У Београду,  
27. августа 2024. године

С поштовањем,



др Миљан Дашић  
научни сарадник

Број 080-1510/1  
Датум 26-08-2024

## Научном већу Института за физику у Београду

**Предмет: Мишљење руководиоца лабораторије о реизбору др Миљана Дашића у звање научни сарадник**

Др Миљан Дашић је запослен у Лабораторији за примену рачунара у науци, у оквиру Националног центра изузетних вредности за изучавање комплексних система Института за физику у Београду. У истраживачком раду бави се темама везаним за моделирање нанотриболошких феномена у различитим системима и материјалима. С обзиром да испуњава све предвиђене услове у складу са Правилником о стицању истраживачких и научних звања ресорног министарства, сагласан сам са покретањем поступка за реизбор др Миљана Дашића у звање научни сарадник.

За састав комисије за реизбор др Миљана Дашића у звање научни сарадник предлажем:

- (1) др Вељко Јанковић, виши научни сарадник, Институт за физику у Београду,
- (2) др Игор Станковић, научни саветник, Институт за физику у Београду,
- (3) др Сунчица Елезовић-Хацић, редовни професор Физичког факултета Универзитета у Београду.

  
др Антун Балаж

научни саветник

Руководилац Лабораторије за примену рачунара у науци

## Стручна биографија др Миљана Дашића

Миљан Дашић рођен је 3.11.1990. године у Параћину, Србија. Завршио је ОШ „Момчило Поповић-Озрен“ и природно-математички смер Гимназије у Параћину, обе као ученик генерације и носилац Вукове дипломе. Награђиван је специјалним дипломама за српски језик и књижевност, математику, физику, хемију и програмирање, за остварене резултате на такмичењима.

Дипломирао је 5. јула 2013. године на Одсеку за физичку електронику Електротехничког факултета Универзитета у Београду, са просечном оценом 9.93. Свој дипломски рад реализовао је у Лабораторији за нанофотонске системе Универзитета Колорадо Болдер у Сједињеним Америчким Државама (Nanophotonic Systems Laboratory, University of Colorado Boulder, United States of America) под менторством проф. др Милоша Поповића. У току основних студија стручно се усавршавао на иностраним универзитетима и институтима: 2011. године три месеца је радио на Тиндал националном институту у Корку у Ирској (Tyndall National Institute, Cork, Ireland), у оквиру UREKA 2011 летње научне праксе; потом је 2012. године четири месеца радио на Универзитету Колорадо Болдер у Сједињеним Америчким Државама, као истраживач сарадник у лабораторији за нанофотонске системе; у 2013. години, у оквиру IAESTE стручне праксе, три месеца је радио на Лапенранта Технолошком Универзитету у Лапенранти у Финској (Lappeenranta University of Technology, Lappeenranta, Finland). Мастер студије завршио је 16. јула 2014. године, на Одсеку за физичку електронику Електротехничког факултета Универзитета у Београду, са просечном оценом 10.00. Свој мастер рад реализовао је у Лабораторији за примену рачунара у науци на Институту за физику у Београду, под менторством др Игора Станковића. Октобра 2014. године уписао је докторске студије на Физичком факултету Универзитета у Београду, на смеру физика кондензоване материје и статистичка физика. Од новембра 2014. године запослен је у Лабораторији за примену рачунара у науци Института за физику у Београду. Реализовао је стручну праксу у Одељењу за напредне технологије Техничког Центра компаније Тојота Мотор Европа, са седиштем у Завентему у Белгији (Advanced Technology Division, Technical Center, Toyota Motor Europe, Zaventem, Belgium) у периоду од 5. октобра 2015. до 8. априла 2016. године. Докторске студије на Физичком факултету завршио је са проценом оценом 9.75. Вредно је поменути да је полагао и два додатна испита са основних студија физике (Теоријска Механика и Теорија Кондензованог Стања), и на оба је добио оцену 10. Дана 23. септембра 2019. године, Миљан Дашић је одбранио своју докторску дисертацију написану на енглеском језику под називом „Modeling the Behaviour of Confined Dipolar and Ionic Systems” (назив докторске тезе на српском језику: „Моделовање понашања просторно ограничених диполних и јонских система”) на Физичком факултету Универзитета у Београду. Ментор Дашићеве докторске дисертације био је др Игор Станковић, научни саветник Института за физику у Београду.

Изабран је у звање научни сарадник 27.3.2020. године. Имао је идеју и жељу да се стручно усавршава у иностранству. Тиме би, поред нових знања и искустава, остварио и драгоцене научне контакте и поставио темеље будућих научних сарадњи. У периоду од 1. новембра 2019. године до 31. децембра 2021. године, др Дашић је радио на Чешком Техничком Универзитету у Прагу у Чешкој (Czech Technical University in Prague, Czech Republic) као постдокторски истраживач. По завршетку наведеног постдока, др Дашић се вратио из Прага у Београд и провео је 2022. годину радећи на свом матичном Институту за физику у Београду. Схватајући значај међународних сарадњи у модерној науци, а нарочито постдокторских усавршавања у иностранству, потражио је нови постдок. Узимајући у обзир своје јако добре утиске о Прагу као граду и Чешкој као држави, али и свој високи ниво знања чешког језика, радо је прихватио могућност повратка у Праг. Од 1. марта 2023. године ради на Институту за органску хемију и биохемију Чешке Академије Наука у Прагу (Institute of Organic Chemistry

and Biochemistry, Czech Academy of Sciences in Prague), и то такође као постдокторски истраживач.

Добитник је више награда за своја научна постигнућа, како на домаћем, тако и на међународном нивоу. Најмлађи је учесник регуларног дела међународне конференције ТЕЛФОР 2012, одржане новембра 2012. године у Сава центру у Београду. Тада је, као студент четврте године основних студија, презентовао свој рад са Универзитета Колорадо Болдер у регуларној сесији. Освојио је друго место на тимском такмичењу у студији случаја на Локалном Инжењерском Такмичењу (Local Engineering Competitio), марта 2012. у Београду. Освојио је треће место на тимском такмичењу у бизнис идејама, на Academy of Modern Management (АММ), децембра 2012. у Београду. Награђен је за најбољи рад (Best paper award) на конференцијама: 5. и 7. међународна IEEEESTEC конференција, које су одржане новембра 2012. и 2014. године респективно, на Електронском факултету Универзитета у Нишу. Носилац је стипендије Фонда за младе таленте (Доситеја) за школску 2012/2013 и 2013/2014 годину. Изабран је за члана клуба СУПЕРСТЕ за 2014. годину, у области природних наука. То је годишњи конкурс ЕРСТЕ банке, са циљем подршке младим талентима Србије. Добитник је две награде за своју докторску дисертацију. Наиме, др Дашић је прво добио студентску награду Института за физику у Београду за најбољу докторску дисертацију одбрањену током 2019. године, а потом и награду Привредне Коморе Србије за најбоље докторске дисертације са применама у привреди за академску школску годину 2018/2019. Као члан COST акције МесаNano, добио је грант за учешће на конференцији која ће се одржати у септембру 2024. године у Прагу (ITC Conference Grant; ITC – Inclusive Target Countries).

Дашић је до избора у звање научни сарадник објавио пет радова у међународним часописима (по категоријама: 1 рад М21а, 3 рада М21, 1 рад М22), као и више саопштења на међународним конференцијама, која су штампана у целини или у изводу. Након избора у звање научни сарадник, др Дашић је објавио четири рада у међународним часописима (по категоријама: 1 рад М21а, 2 рада М21, 1 рад М22), као и више саопштења на међународним конференцијама, штампаних у изводу.

Одржао је предавање по позиву на међународном научном скупу The Training School of COST action CA21101 COSY под називом “Multiscale modeling of the properties of compounds: From isolated molecules to 3D materials relevant for industrial and astrophysical applications”, који је одржан септембра 2023. године у Београду. Такође, одржао је предавање по позиву на међународном научном скупу The 1st WG2 Virtual meeting of COST action CA21101 COSY под називом “From quantum to classical dynamics of isolated molecules and 3D materials”, који је одржан у фебруару 2024. године у Београду. Дашић сматра да је образовање научног подмлатка од стратешког интереса за српску науку, тако да је радо прихватио позив и одржао два предавања на семинарима физике у Истраживачкој Станици Петница, у јуну и јулу 2022. године, респективно. Такође, као некадашњи студент Електротехничког факултета у Београду, радо је прихватио позив да одржи предавање на догађају Дани Фотонике 2023, одржаном у децембру 2023. године.

Менторисао је два пројекта на петничком семинару физике (2019. и 2022. године), који су успешно реализовани; наиме, полазници су учествовали на петничкој конференцији и објавили своје радове у Петничким Свескама. Поред тога, др Дашић је био ментор и члан комисије за одбрану мастер тезе Матеје Јовановића, која је одбрањена у септембру 2023. године на Физичком факултету Универзитета у Београду.

Рачунајући само период након избора у звање научни сарадник, рецензирао је 15 научних радова за 10 различитих међународних часописа (по категоријама: 4 рецензије М21а радова, 4 рецензије М21 радова, 7 рецензија М22 радова).



Поред свог матерњег српског језика, на коме се подједнако добро служи и екавицом и ијекавицом, др Дашић течно говори енглески, руски и чешки језик. На одређеном нивоу разуме и служи се француским и шпанским језиком.

Др Дашић сматра да је комуникација кључ успостављања добросуседских односа, а језик је средство комуникације. Према томе, у слободно време помало учи језике народа са којима Република Србија дели државну границу: на истоку (бугарски језик), и на југу дуж планинских масива Проклетија, Паштрика и Шаре (албански језик).

Током првог постдока на Чешком Техничком Универзитету у Прагу успешно је комплетирао два онлајн курса везано за паралелно програмирање: Introduction to MPI (у мају 2021. године) и Advanced MPI (у октобру 2021. године). Поменуте курсеве је организовао IT4Inovations National Supercomputing Center (Ostrava, Czech Republic), што је Чешки Национални Суперрачунарски Центар.

Радо и често развија Bash скрипте у Linux-у. За комплексне рачунарске симулације користи суперрачунарске перформансе (PARADOX на Институту за физику у Београду; користио је интерни Тојотин кластер у Белгији; у Чешкој користи интерни кластер на Институту за органску хемију и биохемију Чешке Академије Наука, као и суперрачунарске ресурсе Националног Суперрачунарског Центра у Острави).

Од програмских језика течно говори C, Fortran и Python.

## Преглед научне активности др Миљана Дашића

Научно-истраживачки рад др Миљана Дашића припада области физике кондензованог стања и статистичке физике, као и области научног рачунарства (scientific computing), а заснива се на теорији и рачунарским симулацијама. Кандидат је запослен у Лабораторији за примену рачунара у науци, у оквиру Националног центра изузетних вредности за изучавање комплексних система Института за физику у Београду. Био је запослен као постдок на Чешком Техничком Универзитету у Прагу (новембар 2019. – децембар 2021.), а тренутно је запослен на Чешкој Академији Наука у Прагу (од 1. марта 2023.), такође као постдок.

Досадашње теме на којима је кандидат радио могу се разврстати на следећи начин:

- (1) рачунарски магнетизам;
- (2) рачунарска нанотрибологија;
- (3) развој нових метода и софтвера за примене у науци;
- (4) рачунарски дизајн лекова.

У оквиру теме (1) кандидат се бавио диполним тубама и хеликсима током доктората (тј. пре избора у звање научни сарадник); у оквиру теме (2) кандидат се током доктората бавио чистим јонским течностима, а потом (тј. након избора у звање научни сарадник) бавио се ванадијум-оксидима, мешавинама јонских течности са водом, као и моделовањем експеримената на бази микроскопије атомских сила (конкретно, наноскопско трење на молибден-дисулфиду у присуству молекула воде); у оквиру теме (3) кандидат је радио на развоју и применама метода нормалне динамике (током првог постдока), а сада активно ради на развоју метода и софтвера за моделовање протеин-лиганд интеракција (током другог постдока); у оквиру теме (4) кандидат примењује свој софтвер, као и већ развијене софтвере, са циљем оптималног рачунарског дизајна лекова (computer-aided drug design), а на датој теми ради током свог другог постдока.

### Научна активност до избора у звање научни сарадник

За време докторских студија кандидат је радио на темама у вези са истраживањем структуре и понашања просторно ограничених диполних и јонских система, под менторством др Игора Станковића. Конкретно, радио је на истраживању диполних структура туба и хеликса формираних од чврстих диполних сфера са сталним диполним моментом и јонских течности. Иако су то два различита физичка система, заједничко им је то што су дипол-диполна и Кулонова интеракција дугодометне у датим системима, који су посматрани у 3D простору.

#### (1) Тема: диполне тубе и хеликси

У оквиру прве теме, кандидат је имплементирао директно сумирање дипол-диполне интеракције за рачунање кохезионе енергије коначних структура, као и Лекнеров метод за сумирање дипол-диполне интеракције за 1D бесконачне периодичне структуре. На основу геометријских параметара направио је преглед различитих класа тубуларних и хеликоидних диполних структура и потом је извео изразе за површинску густину паковања за случај свих класа туба и за општи случај вишеструко намотаних густо пакованих хеликса. Спровео је статичку анализу и добио да кохезиона енергија немонотонно зависи од густине паковања при компресији хеликса и порасту њихове густине паковања. Ради детаљног описа испитиваних структура, уведени су адекватни параметри уређења који описују различите режиме уређења ових структура. Конкретно, кандидат је радио на развоју симулација за генерисање диполних структура и прорачун њихове кохезионе енергије, као и за прорачун параметара попут површинске густине паковања, оријентације дипола и уведених параметара уређења. Такође, радио је на визуелизацији репрезентативних структура. Резултат тог ангажмана је научни рад **“Structure and Cohesive Energy of Dipolar Helices” објављен 2016. године у врхунском међународном часопису Soft Matter**. Приликом одређивања диполне оријентације основног

стања (ground state) различитих типова диполних хеликса и туба, кандидат је дошао до резултата да је за одређене тубе основно стање антиферромагнетна оријентација диполних момената. Тај резултат је послужио као подстицај за детаљније истраживање ферромагнетних и антиферромагнетних диполних туба и кандидату донео коауторство у научном раду **“A platform for nanomagnetism – assembled ferromagnetic and antiferromagnetic dipolar tubes”** који је објављен 2019. године у међународном часопису изузетних вредности **Nanoscale**.

## **(2) Тема: моделовање јонских течности у нанотрибологији**

Друга тема на којој је кандидат радио јесте моделовање јонских течности методом молекуларне динамике са потенцијалним циљем њихове примене као мазива у аутомобилској индустрији. Миљан Дашић је у периоду од 5. октобра 2015. до 8. априла 2016. године био на стручној пракси (research internship) у Одељењу за напредне технологије Техничког Центра аутомобилске компаније Тојота Мотор Европа (Advanced Technology Division, Technical Center, Toyota Motor Europe) у Завентему (Белгија). По повратку на Институт за физику у Београду наставио је рад на датом Тојотином пројекту у оквиру свог истраживачког рада на докторским студијама. Јонске течности су интересантне због својих триболошких особина – малог коефицијента трења, негативног притиска паре, и формирања саморганизованих танких слојева који пружају заштиту од хабања. Релативно нова област нанотрибологија односи се на специфичну грану трибологије која проучава феномене трења, подмазивања и хабања на наноскали. Научна дисциплина рачунарске нанотрибологије успостављена је у последњих неколико деценија, а рачунарски ресурси омогућавају примену метода рачунарске нанотрибологије на временске и просторне скале које су интересантне за развој технологије и индустрију. У пракси постоји велики број јонских течности које су потенцијални кандидати као чиста мазива или додаци мазивима. Рачунарске симулације омогућавају разумевање механизма који утичу на квалитет јонске течности као подмазивача – јачине њене интеракције са подлогом, квашења, и вискозности на молекуларном нивоу. Познавање механизма којим молекуларни процеси утичу на особине јонске течности на нивоу једноставних модела битно је за избор јонских течности (постоји јако велики број могућих комбинација) који претходи њиховом експерименталном тестирању и помаже разумевању добијених експерименталних резултата. Кандидатов допринос односи се на софтверску имплементацију, извршавање симулација, обраду резултата и визуелизацију. Резултат тог ангажмана је учешће на међународној конференцији Лидс-Лион у септембру 2016. године и научни рад **“Molecular dynamics investigation of a model ionic liquid lubricant for automotive applications”** објављен 2017. године у врхунском међународном часопису **Tribology International**. Поред наведеног научног рада, ту је и научни рад **“Influence of confinement on flow and lubrication properties of a salt model ionic liquid investigated with molecular dynamics”** који је објављен 2018. године у истакнутом међународном часопису **The European Physical Journal E**. У дата два рада разматран је најједноставнији модел јонске течности, познат као SM (salt-like) модел, у оквиру кога се јонска течност моделује једнаким бројем позитивно наелектрисаних катјонских и негативно наелектрисаних анјонских Ленард-Џонс сфера. Након што је стечено искуство у симулацијама молекуларне динамике са базичним SM моделом, имплементиран је унапређени модел, који укључује неутрални реп повезан еластичном опругом са катјоном, а који моделује неутрални алкилни ланац у катјонским молекулима јонских течности. Дати модел се назива TM модел (tailed model) и у оквиру њега се јонска течност моделује једнаким бројем катјон-реп димера и анјона, при чему се као и у SM моделу користе позитивно и негативно наелектрисане Ленард-Џонс сфере за катјоне и анјоне, респективно, док су репови електронеутралне Ленард-Џонс сфере. Код TM модела испитан је утицај величине неутралног репа, тако што су за величину репа узете три репрезентативне вредности од 3, 5 и 9 ангстрема, према томе разматрани су TM3, TM5 и TM9 модел јонске течности. За случај SM и TM модела спроведене су симулације одређивања статичке и динамичке сила-растојање (force-distance)

карактеристике, као и симулације трења, а у оквиру сваке од тих симулација приказана је структура јонске течности у карактеристичним тачкама са пратећом расподелом јонске концентрације дуж релевантне z-осе. Резултати истраживања са ТМ моделом јонске течности представљени су у раду **“Molecular dynamics investigation of the influence of the shape of the cation on the structure and lubrication properties of ionic liquids” који је објављен 2019. године у врхунском међународном часопису Physical Chemistry Chemical Physics.**

Учешћем у истраживању јонских течности у сарадњи са аутомобилском компанијом Тојота, кандидат је дао добар пример повезивања науке и привреде. Дато истраживање представља примену теоријских знања и вештина на реалне проблеме који су од интереса у индустрији.

### **Научна активност након избора у звање научни сарадник**

Кандидат реализује своје научне активности након избора у звање научни сарадник кроз запослење на две чешке научне институције на позицији постдока, као и радећи у својој матичној Лабораторији за примену рачунара у науци на Институту за физику у Београду.

#### **(а) Постдок на Чешком Техничком Универзитету у Прагу**

Кандидат је након докторирања конкурисао и добио постдок позицију у Групи за напредне материјале (Advanced Materials Group) на Електротехничком факултету Чешког Техничког Универзитета у Прагу (Czech Technical University in Prague). Уз Карлов Универзитет, Чешки Технички Универзитет представља најреспектабилнију и најпознатију високошколску установу у Чешкој, са значајним фокусом на научноистраживачки развој. Током овог постдока (у периоду од 1. новембра 2019. до 31. децембра 2021.) научно се бавио двама темама: (1) развој и примене метода нормалне динамике и (2) нанотрибологија ванадијум-оксида.

#### **(1) Тема: развој и примене метода нормалне динамике**

Др Дашић је за прву тему током датог постдока имао развој и верификацију новог метода у физици/науци о материјалима, на којој је радио заједно са двојицом колега: др Антониом Камаратом и др Паолом Николинијем. Првих неколико месеци провео је припремајући се за успешан рад, тако што је научио да кодира у програмском језику Фортран (до тада је радио софтверски развој у MATLAB-у и програмском језику C). Поред тога, упознао се са теоријом чије је разумевање и примена била неопходна у оквиру дате теме. Рад на овој теми представља значајно искуство и искорак у научној каријери др Дашића, зато што је по први пут радио на развоју и имплементацији новог метода моделовања у физици, а не само на примени већ постојећих метода (попут метода молекуларне динамике). Свакако је теоријско познавање и искуство у применама метода молекуларне динамике (Molecular Dynamics - MD) било драгоцену за развој новог метода нормалне динамике (Normal Dynamics – ND), зато што ND суштински представља еквивалент MD-а у реципрочном простору. Употреба нормалних координата је и одредница која је дала назив новом методу.

Након овог општег увода, размотримо конкретније: молекуларна динамика се у суштини своди на решавање Њутнових једначина кретања датог система атома у картезијанским координатама. Нормална динамика у својој суштини преиначава Њутнове једначине кретања помоћу фононских нормалних мода, користећи адекватно узорковање (sampling) реципрочног простора, што омогућава: (1) повећање рачунарске ефикасности (тј. скраћивање времена извршавања програма) бирањем који и колико таласних вектора Бриуленове зоне ће бити разматрани, и (2) узимање у обзир дисторзија преко великих атомских растојања без потребе за коришћењем великих симулационих ћелија (simulation cell). Дати приступ је имплементиран у Фортран код, који је потом примењен у три студије случаја. Главни циљ је био верификација развијеног софтвера, али и демонстрација могућности и значаја његове употребе за научну заједницу која се бави моделовањем и

симулацијама материјала. У првој студији случаја приказана је општа стратегија узорковања реципрочног простора, а конкретно је рачуната фононска дисперзија кристалног силицијума; у другој студији случаја приказан је потенцијал метода тако што је изучаван стабилизациони ефекат температуре у  $\alpha$ -уранијуму; у трећој студији случаја истраживана је карактеризација Раманског спектра на различитим температурама у  $\text{MoS}_2/\text{MX}_2$  хетероструктурама на бази дихалкогенида прелазних метала. Кроз тако разнолике студије случаја, приказано је и дискутовано о томе како метод нормалне динамике поседује општи значај, и може се применити на симулирање периодичних<sup>а</sup>, семипериодичних<sup>б</sup> и коначних<sup>в</sup> система, попут кристала<sup>а</sup>, плоча (slabs)<sup>б</sup> и молекула<sup>в</sup>.

Изворни код (source code) комплетног Фортран софтвера, који је кандидат у сарадњи са двојицом колега развио, налази се на линку: <https://github.com/acammarat/pindol>. На датом линку се налазе и помоћни софтвери који се користи за прет- и пост- процесирање симулација нормалне динамике, као и примери примене са детаљним упутствима за нове кориснике. Нормална динамика се може једноставно дефинисати као метод који је алтернатива добро познатом и широко примењиваном методу молекуларне динамике. Мотивација и идеја др Дашића и његових сарадника, јесте употреба новог алтернативног метода од стране широког круга колега научника и инжењера, који се баве симулацијама и моделовањем материјала. Из тог разлога, сав софтвер је слободно доступан и бесплатан (објављен је као open-source код, под лиценцом која омогућава бесплатну употребу, уз добру праксу цитирања аутора основне верзије). Резултати рада на овој теми представљени су у научном раду **“Integrating Newton’s Equations of Motion in the Reciprocal Space” који је објављен 2024. године у врхунском међународном часопису Journal of Chemical Physics**. Кандидатов допринос се превасходно односи на теоријски развој метода и његову софтверску имплементацију, потом на рад на истраживању и формалној анализи, као и на ревизију и едитовање текста рада, што му је донело коауторство (другопотписани аутор) на поменутом раду. Конкретно, по систему одређивања доприноса аутора часописа Journal of Chemical Physics, овако изгледа списак кандидатових доприноса - Miljan Dašić: Formal analysis (equal); Investigation (equal); Methodology (equal); Software (equal); Writing – review & editing (equal).

## (2) Тема: моделовање ванадијум-оксида у нанотрибологији

У оквиру дате теме, кандидат је радио на развоју и применама симулација молекуларне динамике на нанотриболошки систем који се састоји од два кристална слоја направљена од ванадијум-пентоксида ( $\text{V}_2\text{O}_5$ ) и пет различитих стохиометрија аморфног ванадијум-оксида смештених између датих кристалних слојева. Поента је била испитати нанотриболошке карактеристике аморфних ванадијум-оксида при различитим температурама и примењеној нормалној сили на горњи кристални  $\text{V}_2\text{O}_5$  слој. Драгоцена новина у односу на искуства стечена током доктората, представља примена метода реактивне молекуларне динамике, са чиме се кандидат први пут сусрео током постдока. Конкретно, симулирано је следећих пет стохиометрија ванадијум-оксида:  $\{\text{V}_2\text{O}_3, \text{V}_3\text{O}_5, \text{V}_8\text{O}_{15}, \text{V}_9\text{O}_{17}, \text{VO}_2\}$ . Занимао нас је трибо-перформанс у условима повишене температуре и притиска, тако да смо применили температуру од  $\{600, 800, 1000\}$  [K], и притисак од  $\{1, 2, 3, 4\}$  [GPa], укључујући и референтни случај без примењеног спољног притиска. Све разматране стохиометрије омогућавају подмазивање са релативно ниским коефицијентом трења од 0.2, што је вредна информација која је релевантна за дизајн премаза (coating) у којима је ванадијум у улози подмазивачког агента. Општа тенденција смањивања коефицијента трења са порастом температуре представља триболошки ефекат који је користан за прилагодљиво подмазивање. Примећен је растући тренд офсета силе трења (што је повезано са ефектом адхезије), са смањењем садржаја кисеоника у ванадијум-оксидима. Резултати рада на овој теми представљени су у научном раду **“Tribological properties of vanadium oxides investigated with reactive molecular dynamics” који је објављен 2022. године у међународном часопису изузетних вредности Tribology International**. Кандидат је дао веома значајан допринос изради овог рада, тако да је у улози првог аутора, као и кореспондент аутора. Конкретно, по

систему одређивања доприноса аутора часописа Tribology International, овако изгледа списак кандидатових доприноса - Miljan Dašić: Methodology, Validation, Formal analysis, Investigation, Data curation, Writing – original draft, Writing – review & editing, Visualization.

### **(б) Период између два постдока**

По завршетку првог постдока, др Дашић је у својој матичној Лабораторији за примену рачунара у науци на Институту за физику у Београду радио у домену симулација молекуларне динамике, при чему су теме биле: (1) моделовање мешавина јонских течности и воде, (2) моделовање AFM (Atomic Force Microscopy) експеримената, као и (3) наставак рада на нанотриболошким карактеристикама ванадијум-оксида.

### **(1) Тема: транспортне карактеристике мешавина јонске течности и воде**

У оквиру ове теме кандидат је сарађивао са својим ментором са доктората, др Игором Станковићем, као и са студентом мастер студија на Физичком факултету Универзитета у Београду, Матејом Јовановићем. Изучаване су транспортне и термодинамичке карактеристике фосфонијумских јонских течности помешаних са водом, у различитим односима. Кроз детаљну студију засновану на симулацијама молекуларне динамике, добијени су ефекти садржаја воде у поменутих мешавинама, што се тиче температуре кључања, дифузије и вискозности. Теме су остварени драгоцени увиди на молекуларном нивоу у утицај количине воде на карактеристике јонских течности помешаних са водом. Дати системи, поред фундаменталног значаја, поседују и значај са аспекта технолошких примена. Резултати добијени у оквиру ове теме представљени су у раду **“Effects of Water Content on the Transport and Thermodynamic Properties of Phosphonium Ionic Liquids” који је објављен 2024. године у истакнутом међународном часопису ACS Langmuir**. Кандидатов допринос је превасходно везан за развој LAMMPS скрипти за симулације молекуларне динамике, као и на ревизију и едитовање текста рада, што му је донело коауторство (другопотписани аутор).

Битно је истаћи да је др Дашић менторисао мастер рад Матеје Јовановића, под називом “Симулације структурних, термодинамичких и механичких карактеристика мешавине јонске течности и воде методом молекуларне динамике: пример [bmim]<sup>+</sup>[PF<sub>6</sub>]<sup>-</sup> јонске течности”, који је одбрањен на Физичком факултету Универзитета у Београду у септембру 2023. године. Др Дашић је поред менторства, био и члан комисије за одбрану поменутог мастер рада.

### **(2) Тема: моделовање АФМ експеримената**

Током првог постдока у Прагу, кандидат се упознао са проф. Роненом Берковичем са Бен Гурион Универзитета у Биршиви (Израел), који је тада био у посети на Чешком Техничком Универзитету у Прагу, и одржао предавање о својим истраживањима. Др Дашић је препознао потенцијал за плодној научну сарадњу, са обзиром на своје знање и искуство у домену симулација молекуларне динамике, што је експертиза комплементарна са експериментима помоћу микроскопа атомских сила (Atomic Force Microscope – AFM), што је основни метод рада проф. Берковича. Договорена је сарадња, при чему тим за симулације чине др Дашић и његов ментор са доктората, а сада колега научник, др Станковић, док је проф. Беркович окупио тим својих студената и колега научника из Израела. Систем који је експериментално и симулационо истраживан се састоји од пробе састављене од аморфног силицијум-диоксида (SiO<sub>2</sub>) и једнослојног кристала молибден-дисулфида (MoS<sub>2</sub>), при чему су присутни молекули воде. У експериментима постоје две количине и просторне расподеле молекула воде: кондензована водена капилара услед одређене влажности ваздуха, и проба наменски потпуно потопљена у воду. У симулацијама су имплементирана поменута два система, уз додатни систем који је имао улогу референтног система: проба обложена водом (water coated probe), али је количина воде мала да би се формирала капилара. Суштински, испитиван је утицај количине и просторне расподеле молекула воде на наноскопско трење, у клизећем контакту пробе и узорка. Резултати, како експеримената тако и симулација, показују

да се stick-slip\* трење (\*тип трења који се јавља при клизању преко кристалних површина) на резолуцији константе решетке узорка, може постићи са заробљеним молекулима воде присутним у наноконтакту, при широком опсегу интензитета нормалне силе примењене на пробу. Резултати рада на овој теми представљени су у научном раду **“Role of Trapped Molecules at Sliding Contacts in Lattice-Resolved Friction”** који је објављен 2024. године у врхунском међународном часопису **ACS Applied Materials & Interfaces**. Кандидат је дао веома значајан допринос изради овог рада, тако да је у улози првог аутора, као и кореспондент аутора.

Преознавањем потенцијала синергије експертиза из домена симулација и експеримената, као и иницирањем сарадње српске и израелске научне институције, кандидат је дао добар пример остваривања међународне научне сарадње. Договорене су будуће теме за сарадњу између српског и израелског тима, тако да се очекује објављивање нових радова као исход дате сарадње.

### **(3) Тема: наставак рада на моделовању ванадијум-оксида у нанотрибологији**

На основу стеченог искуства приликом рада на теми (2), конкретније на основу дизајна симулационе поставке која репрезентује AFM експеримент, кандидат је дошао на идеју за развој реалистичније симулационе поставке за испитивање нанотриболошких карактеристика ванадијум-оксида. Таква поставка укључује латералне резервоаре који омогућавају истискивање аморфног ванадијум-оксида из процепа између чврстих површина, што није случај са симулационом поставком у раду објављеном у часопису *Tribology International* 2022. године, која је поприлично идеалистична. Др Дашић је иницирао и договорио наставак рада на овој теми са колегом др Пономаревим, својим коаутором на раду *“Tribological properties of vanadium oxides investigated with reactive molecular dynamics”* из 2022. године, а који и даље ради као постдок на Чешком Техничком Универзитету у Прагу. Осим промене геометрије поставке, кључна новина је што су чврсте површине уместо фиксираних  $V_2O_5$  слојева сада ВСС (Body Centered Cubic) кристали ванадијума, а уместо предефинисаних стохиометрија аморфних ванадијум-оксида, иницијално је присутна одређена количина кисеоника који реактивно оксидује ванадијум, формирајући тако ванадијум-оксид чија стохиометрија динамички зависи од количине кисеоника у систему. На тај начин, постигнута је веома реалистична симулација, којом се може постићи далеко квалитетније моделовање ванадијум-оксида (што је од интереса за технолошке примене), за разлику од првог рада, који доминантно има теоријски значај. По договору са колегом др Пономаревим, резултати овог истраживања биће представљени у раду који ће бити послат у међународни часопис изузетних вредности *Tribology International*. Првопотписани ће бити др Пономарев, а другопотписани др Дашић, при чему ће обојица бити кореспондент аутори.

Наведени рад ће бити презентован као резултат међународне српско-чешке сарадње, између Института за физику у Београду и Чешког Техничког Универзитета у Прагу.

### **(в) Постдок на Чешкој Академији Наука у Прагу**

Након свог првог постдока, др Дашић је увидео значај и позитивне ефекте постдока у иностранству на свој научни напредак и усавршавање. Узимајући у обзир свој висок ниво знања чешког језика и позитивне утиске о Прагу, конкурисао је на отворену позицију постдока на Чешкој Академији Наука, коју је и добио и кренуо да ради тамо од 1. марта 2023. године.

### **(1) Тема: развој метода и софтвера за моделовање протеин-лиганд интеракција**

На свом другом постдоку др Дашић ради у групи за Нековалентне интеракције Института за органску хемију и биохемију Чешке Академије Наука у Прагу. Иако по образовању није хемичар већ физичар, др Дашић поседује фундаментално знање квантне механике, као и знање и искуство из домена молекуларне динамике, што је

неопходно за ефикасан рад на датој позицији. Таква основа се показала довољном за стицање нових доменских знања као и за напредак у новој области за кандидата. Област би се могла дефинисати као моделовање и симулирање протеин-лиганд интеракција, у којима заправо кључну улогу играју нековалентне интеракције. Протеини су велики биомолекули (реда неколико хиљада атома), док су лиганди мали органски молекули (реда неколико десетина до стотину атома) и представљају кандидате за лекове. Дакле, протеин је циљ на који се примењује лек (тј. Лиганд). Од суштинског је значаја за дати протеин ефикасно пронаћи потенцијалне лекове, што се мери на основу јачине везивања лека за протеин. Примена чисто квантно-механичких модела је најпрецизнија, али по питању рачунарске ефикасности је веома спора. Са друге стране, употреба молекуларних модела је далеко мање прецизна, али су и такви прорачуни далеко бржи. Идеално решење је комбиновање датих модела, при чему се долази до QM/MM (Quantum Mechanics/Molecular Mechanics) метода.

Техничка знања и искуства у развоју научног софтвера које је кандидат стекао током доктората и нарочито првог постдока, омогућила су му да брзо научи програмски језик Python и да крене успешно и ефикасно да развија софтвер током свог другог постдока. Укратко, кандидат се бави развојем аутоматизованих протокола за припрему и оптимизацију молекула протеина и лиганада, што је веома релевантно за научну дисциплину која се назива рачунарски дизајн лекова (computer-aided drug design). Приликом сарадње са колегама који су по образовању хемичари, показало се да је физичарски начин размишљања и решавања проблема др Дашића, као и његова техничка ригорозност која долази из ескпертизе развоја софтвера, врло корисна за проблематику којом се бави. Према томе, кандидат даје значајан допринос у научноистраживачким активностима своје групе у Прагу.

## **(2) Тема: примена софтвера у домену рачунарског дизајна лекова**

Др Дашић примењује софтвер који је самостално развио за припрему и оптимизацију молекула протеина и лиганада, које потом симулира и оцењује јачину њиховог везивања помоћу доступних софтвера (развијених у истраживачкој групи у којој ради, или лиценцираних софтвера различитих компанија). За разлику од развоја софтвера што је тема општег значаја, пошто је примењива у општем случају молекула протеина и лиганада, у другој теми је фокус на пажљиво одабраним репрезентима протеина и лиганада, који су од интереса у домену дизајна лекова и фармације. До сада је др Дашић учествовао на неколико међународних конференција на којима је представио резултате са свог другог постдока, док је у фази писања рад на коме ће бити први аутор. Још увек је рано одредити у који часопис ће поменути рад бити послат. Са обзиром на репутацију прашке групе у којој ради, као и на њихову историју објављивања, у питању ће вероватно бити неки врхунски међународни часопис.



# Елементи за квалитативну оцену научног доприноса

## 1. Квалитет научних резултата

### 1.1 Значај научних резултата

Значај научних резултата др Дашића огледа се у томе што су објављени у међународним часописима изузетних вредности (2 рада), врхунским међународним часописима (5 радова), као и истакнутим међународним часописима (2 рада). Поред тога, др Дашић је учествовао на великом броју међународних конференција и научних скупова, на којима је презентовао своје резултате и учествовао у дискусијама са колегама из својих научних области. Поред активности везаних за објављивање и презентовање, позитивна цитираност и постигнути h-фактор потврђују значај кандидатових научних резултата.

#### - Период пре избора у звање научни сарадник

У периоду пре избора у звање научни сарадник, кандидат је радио на две суштински различите истраживачке теме: (1) диполне тубе и хеликси и (2) нанотрибологија јонских течности. У оквиру прве теме кандидат је објавио два рада у научним часописима (**Soft Matter (2016)**, **Nanoscale (2019)**), док је у оквиру друге теме објавио три рада у научним часописима (**Tribology International (2017)**, **The European Physical Journal E (2018)**, **Physical Chemistry Chemical Physics (2019)**).

#### - Период након избора у звање научни сарадник

У периоду након избора у звање научни сарадник до покретања процедуре за реизбор у звање научни сарадник, кандидат је радио на две суштински различите теме из којих већ има објављене научне радове: (1) моделовање и симулације молекуларне динамике различитих система (ванадијум-оксида, мешавине јонске течности и воде, моделовање AFM експеримената) и (2) развој и примене метода нормалне динамике. У оквиру прве теме кандидат је објавио три рада у научним часописима (**Tribology International (2022)**, **ACS Langmuir (2024)**, **ACS Applied Materials & Interfaces (2024)**), док је у оквиру друге теме објавио један рад у научном часопису (**Journal of Chemical Physics (2024)**).

### 1.2 Параметри квалитета часописа

Кандидат је у свом досадашњем научном раду објавио укупно 9 радова у међународним часописима са ISI листе.

#### - Период пре избора у звање научни сарадник

У периоду пре избора у звање научни сарадник, кандидат је објавио 5 радова у међународним часописима са ISI листе, од чега:

**1 рад категорије M21a** (међународни часопис изузетних вредности)  
Nanoscale [ISSN 2040-3364, **IF2019** 6.895, **SNIP2019** 1.242]

**3 рада категорије M21** (врхунски међународни часописи)  
Soft Matter [ISSN 1744-683X, **IF2016** 3.889, **SNIP2016** 0.906]  
Tribology International [ISSN 0301-679X, **IF2017** 3.246, **SNIP2017** 1.933]  
Physical Chemistry Chemical Physics [ISSN 1463-9076, **IF2019** 3.430, **SNIP2019** 1.814]

**1 рад категорије M22** (истакнути међународни часопис)  
The European Physical Journal E [ISSN 1292-8941, **IF2018** 1.686, **SNIP2018** 1.239]

Библиометријски показатељи дати су у наредној табели:

	IF	M поени	SNIP
Укупно	19.146	39	7.134
Усредњено по чланку	3.829	7.8	1.427
Усредњено по аутору	5.537	11.5	2.113

#### - Период након избора у звање научни сарадник

У периоду након избора у звање научни сарадник, кандидат је објавио 4 рада у међународним часописима са ISI листе, од чега:

**1 рад категорије M21a** (међународни часопис изузетних вредности)  
Tribology International [ISSN 0301-679X, IF2022 6.2, SNIP2022 1.715]

**2 рада категорије M21** (врхунски међународни часописи)  
ACS Applied Materials & Interfaces [ISSN 1944-8244, IF2023 8.3, SNIP2023 3.020]  
Journal of Chemical Physics [ISSN 0021-9606, IF2023 3.1, SNIP2023 2.299]

**1 рад категорије M22** (истакнути међународни часопис)  
ACS Langmuir [ISSN 0743-7463, IF2023 3.7, SNIP2023 2.597]

Библиометријски показатељи дати су у наредној табели:

	IF	M поени	SNIP
Укупно	21.300	31	9.631
Усредњено по чланку	5.325	7.75	2.408
Усредњено по аутору	4.431	7.31	2.180

#### 1.3 Позитивна цитираност научних радова

Према Scopus бази података, научни радови др Миљана Дашића цитирани су укупно 66 пута у међународним научним публикацијама (научним радовима и књигама), од чега 55 пута изузимајући аутоцитате. Према истој бази h-индекс кандидата је 5.

#### 1.4 Међународна сарадња

Међународна активност др Миљана Дашића обухвата:

- (1) постдокторско усавршавање у Групи за напредне материјале Електротехничког факултета Чешког Техничког Универзитета у Прагу  
[1. новембар 2019. - 31. децембар 2021.]
- (2) учешће у COST акцијама CA21121 (European Network for the Mechanics of Matter at the Nano-Scale (MecaNano)) и CA21101 (Confined Molecular Systems: From a New Generation of Materials to the Stars (COSY))  
[октобар 2022. - садашњост]
- (3) иницијатива и активност кандидата у оквиру српско-израелске научне сарадње са проф. Берковичем (Бен Гурион Универзитет, Биршава, Израел)  
[јануар 2022. - садашњост]

→ до сада је објављен 1 рад у врхунском међународном часопису (ACS Applied Materials & Interfaces (2024)), при чему се очекује објављивање даљих радова

- (4) иницијатива и активност кандидата у оквиру српско-чешке научне сарадње са др Пономаревим (Чешки Технички Универзитет у Прагу, Чешка)  
[новембар 2023. - садашњост]

→ у припреми је 1 рад који ће бити послат у међународни часопис изузетних вредности Tribology International, вероватно крајем 2024. године.

- (5) постдокторско усавршавање у Групи за нековалентне интеракције Института за органску хемију и биохемију Чешке Академије Наука у Прагу  
[1. март 2023. - садашњост]

## **2. Нормирање коауторских радова, патената и техничких решења**

### **- Период пре избора у звање научни сарадник**

Радови др Миљана Дашића из периода пре избора у звање научни сарадник засновани су на аналитичким извођењима и комплексним нумеричким симулацијама и имају пет или мање аутора, тако да су рачунати са пуном тежином у односу на број коаутора.

### **- Период након избора у звање научни сарадник**

Радови др Миљана Дашића из периода након избора у звање научни сарадник засновани су на аналитичким извођењима и комплексним нумеричким симулацијама. Од четири објављена рада из овог периода, три рада имају пет или мање аутора, тако да су рачунати са пуном тежином у односу на број коаутора. Поред тога, један објављени рад из овог периода има седам и више аутора, али тај рад укључује експериментални део. Од укупно девет аутора, два аутора су одговорна за симулације (др Дашић и др Станковић са Института за физику у Београду), док је седам аутора одговорно за експерименте (тим проф. Берковича из Израела). У случају датог рада, примењено је нормирање у односу на број коаутора за случај од седам и више коаутора.

## **3. Учешће у пројектима, потпројектима и пројектним задацима**

- (1) кандидат је као представник Чешког Техничког Универзитета у Прагу учествовао на чешко-аустријском пројекту "Diffusion control reducing friction of nanocomposite materials" који су заједнички финансирани Чешка и Аустријска Научна Фондација, током свог првог постдока
- (2) кандидат учествује на интерно финансираном пројекту Института за органску хемију и биохемију Чешке Академије Наука у Прагу у домену рачунарског дизајна лекова, током свог другог постдока
- (3) кандидат учествује на пројектима две COST акције (деталји су дати у секцији везаној за међународну сарадњу), при чему је већ добио финансијску подршку за учешће у два научна скупа поменутих COST акција; поред тога, добио је ITC Conference Grant за учешће на конференцији The 11<sup>th</sup> on Multiscale Materials Modeling која ће се одржати у септембру 2024. године у Прагу
- (4) кандидат учествује у српско-израелском и српско-чешком пројекту научне сарадње (деталји су дати у секцији везаној за међународну сарадњу)

## **4. Активност у научним и научно-стручним друштвима**

### *4.1 Рецензије научних радова*

Др Дашић је након избора у звање научни сарадник рецензирао укупно 15 научних радова за 10 различитих међународних часописа (по категоријама: 4 рецензије M21a радова, 4 рецензије M21 радова, 7 рецензија M22 радова). Докази о рецензентским активностима дати су у прилогу.

### *4.2 Педагошки рад*

Др Дашић је у оквиру педагошког рада и популаризације науке, одржао два предавања по позиву на семинарима физике 1 и 2 у Истраживачкој Станици Петница, у јуну и јулу 2022. године, респективно. Појашњење: семинар физике 1 похађају полазници који су те школске године по први пут у Петници, док семинар физике 2 похађају старији полазници. Докази о поменутиим петничким предавањима која је одржао др Дашић дати су у прилогу.

### *4.3 Чланство у научним и научно-стручним друштвима*

Др Дашић је члан Немачког Друштва Физичара (Deutsche Physikalische Gesellschaft – DPG) од 2022. године.

## **5. Награде и признања за научни рад**

Кандидат је добитник студентске награде Института за физику у Београду за најбољу докторску дисертацију одбрањену током 2019. године. Такође, добитник је награде Привредне Коморе Србије за најбоље докторске дисертације са применама у привреди за академску школску годину 2018/2019. Докази о поменутиим наградама дати су у прилогу.

## **6. Развој услова за научни рад, образовање и формирање научних кадрова**

### *6.1 Менторство на радовима у оквиру семинара физике у Петници*

Кандидат је ментор два полазничка пројекта која су успешно завршена презентацијом полазника на годишњој петничкој конференцији “Корак у науку” и објављивањем радова у “Петничким свескама”. Докази о поменутиим менторствима дати су у прилогу.

Напомена: кандидат је менторство на првом петничком раду започео пре избора у звање научни сарадник, али је оно потрајало и након тог избора, са обзиром да је зборник радова за 2019. годину објављен крајем 2020. године, тако да је кандидат и као научни сарадник био менторски ангажован на поменутом раду.

Списак менторисаних петничких радова:

- (1) “Испитивање течно-чврстог контакта ТМ јонских течности и кристалне подлоге методом молекуларне динамике”  
(2019)  
полазници: Александар Филиповић и Матеј Вучковић
- (2) “Анализа магнетних тубуларних структура у вертикалном хомогеном магнетном пољу”  
(2022)  
полазник: Михајло Срећковић

### *6.2 Менторство и чланство у комисији за одбрану мастер рада*

Кандидат је био ментор и члан комисије за одбрану мастер рада Матеје Јовановића под називом “Симулације структурних, термодинамичких и механичких карактеристика мешавине јонске течности и воде методом молекуларне динамике: пример  $[bmim]^+[PF_6]^-$

јонске течности”, који је одбрањен на Физичком факултету Универзитета у Београду у септембру 2023. године.

### *6.3 Предавање по позиву на манифестацији Дани Фотонике*

Кандидат је одржао предавање по позиву на манифестацији Дани Фотонике на Електротехничком факултету у Београду децембра 2023. године, на којој некадашњи студенти Одсека за физичку електронику презентују свој научни рад млађим колегама са Одсека и учествују у дискусији и саветовању, на тај начин директно подржавајући формирање будућих научних кадрова.

## **7. Утицајност научних резултата**

Утицајност научних резултата кандидата огледа се у броју цитата који су наведени у тачки 1.3 овог документа, као и у прилогу о цитираности. Значај резултата кандидата је такође описан у тачки 1 овог документа.

## **8. Конкретан допринос кандидата у реализацији радова у научни центрима у земљи и иностранству**

Кандидат је своје научноистраживачке активности, пре избора у звање научни сарадник, у већем делу реализовао у Институту за физику у Београду, а у мањем делу у компанији Тојота Мотор Европа у Завентему (Белгија).

Што се тиче научноистраживачких активности након избора у звање научни сарадник, кандидат је већи део времена провео у иностранству (конкретно, у Прагу (Чешка)) радећи као постдок, док је мањи део времена провео на Институту за физику у Београду. Кандидат је значајно и суштински допринео на свим објављеним радовима у којима је учествовао. Иако је др Дашић значајно допринео сваком раду на коме је учествовао, постоје финесе које проистичу из међусобних релација са колегама са којима је радове објављивао и њиховим улогама, те су тако приметне разлике у смислу да ли је првопотписани и кореспондент аутор, или није.

Од укупно 9 објављених радова, др Дашић је први аутор на 4 рада (по категоријама: 1 M21a, 2 M21, 1 M22), други аутор на 4 рада (по категоријама: 1 M21a, 2 M21, 1 M22), и трећи аутор на 1 раду (по категорији: M21).

Истичући радове на којима је др Дашић првопотписани аутор, долазимо до података:

- (1) пре избора у звање научни сарадник, др Дашић је био првопотписани на 2 од 5 радова
- (2) након избора у звање научни сарадник, др Дашић је првопотписани на 2 од 4 рада

Др Дашић тренутно предано ради на припреми два научна рада, од чега је на једном раду други аутор и кореспондент аутор, док је на другом раду први аутор.

## **9. Уводна предавања на конференцијама и друга предавања**

Кандидат је одржао предавање по позиву под називом “Computer-Aided Drug Design” на међународном научном скупу The Training School of COST action CA21101 COSY - “Multiscale modeling of the properties of compounds: From isolated molecules to 3D materials relevant for industrial and astrophysical applications”, који је одржан септембра 2023. године у Београду.

Такође, кандидат је одржао предавање по позиву под називом “Phonon-Inspired Normal Dynamics of Lattices” на међународном научном скупу The 1st WG2 Virtual meeting of COST action CA21101 COSY - “From quantum to classical dynamics of isolated molecules and 3D materials”, који је одржан у фебруару 2024. године у Београду.

Дашић сматра да је образовање научног подмлатка од стратешког интереса за српску науку, тако да је радо прихватио позив и одржао два предавања на семинарима физике у Истраживачкој Станици Петница, у јуну и јулу 2022. године, респективно. Такође, као некадашњи студент Електротехничког факултета у Београду, радо је прихватио позив да одржи предавање на догађају Дани Фотонике 2023, одржаном у децембру 2023. године.

Докази о наведеним предавањима по позиву дати су у прилогу.

## Елементи за квантитативну оцену научног доприноса

Преглед остварених М-бодова по категоријама публикација, након избора у звање научни сарадник (дакле, после 27.3.2020.) дат је у следећој табели:

Категорија	М-бодова по публикацији	Број публикација	Укупно М-бодова	Укупно нормираних М-бодова
<b>М21а</b>	10	1	<b>10</b>	<b>10</b>
<b>М21</b>	8	2	<b>16</b>	<b>13.7</b>
<b>М22</b>	5	1	<b>5</b>	<b>5</b>
<b>М32</b>	1.5	2	<b>3</b>	<b>3</b>
<b>М34</b>	0.5	15	<b>7.5</b>	<b>7.5</b>
			<b>Сума = 41.5</b>	<b>Сума = 39.2</b>

Поређење оствареног броја М-бодова са минималним условима потребним за избор у звање научни сарадник:

Минималан број М-бодова	Потребно	Остварено	Оств. нормираних
<b>Укупно потребно за НС</b>	16	<b>41.5</b>	<b>39.2</b>
<b>М10+М20+М31+М32+М33+ М41+М42</b>	10	<b>34</b>	<b>31.7</b>
<b>М11+М12+М21+М22+М23</b>	6	<b>31</b>	<b>28.7</b>

# Списак публикација др Миљана Дашића

## Радови објављени у међународним часописима изузетних вредности (категорија M21a)

### - Период након избора у звање научни сарадник

1. **M. Dašić**, I. Ponomarev, T. Polcar, and P. Nicolini, "Tribological Properties of Vanadium Oxides Investigated with Reactive Molecular Dynamics", Tribology International 175, 107795 (2022), [ISSN 0301-679X, IF2022 6.2, SNIP2022 1.715].

### - Период пре избора у звање научни сарадник

2. I. Stanković, **M. Dašić**, J. A. Otálora, and C. García, "A platform for nanomagnetism - assembled ferromagnetic and antiferromagnetic dipolar tubes", Nanoscale 11, 2521 (2019), [ISSN 2040-3372, IF2018 6.97, SNIP2018 1.338].

## Радови објављени у врхунским међународним часописима (категорија M21)

### - Период након избора у звање научни сарадник

1. A. Cammarata, **M. Dašić**, and P. Nicolini, "Integrating Newton's Equations of Motion in the Reciprocal Space", Journal of Chemical Physics 161, 084111 (2024), [ISSN 0021-9606, IF2023 3.1, SNIP2023 2.299]
2. **M. Dašić**, R. Almog, L. Agmon, S. Yehezkel, T. Halfin, J. Jopp, A. Ya'akovovitz, R. Berkovich, and I. Stanković, "Role of Trapped Molecules at Sliding Contacts in Lattice-Resolved Friction", ACS Applied Materials & Interfaces 16, 44249 (2024), [ISSN 1944-8244, IF2023 8.3, SNIP2023 3.020].

### - Период пре избора у звање научни сарадник

3. **M. Dašić**, I. Stanković, and K. Gkagkas, "Molecular Dynamics Investigation of the Influence of the Shape of Cation on the Structure and Lubrication Properties of Ionic Liquids", Physical Chemistry Chemical Physics 21, 4375 (2019), [ISSN 1463-9076, IF2019 3.430, SNIP2019 1.814].
4. K. Gkagkas, V. Ponnuchamy, **M. Dašić**, and I. Stanković, "Molecular Dynamics Investigation of a Model Ionic Liquid Lubricant for Automotive Applications", Tribology International 113, 83-91 (2017), [ISSN 0301-679X, IF2017 3.246, SNIP2017 1.933].
5. I. Stanković, **M. Dašić**, and R. Messina, "Structure and Cohesive Energy of Dipolar Helices", Soft Matter 12, 3056 (2016), [ISSN 1744-683X, IF2016 3.889, SNIP2016 0.906].



## Радови објављени у истакнутим међународним часописима (категорија М22)

### - Период након избора у звање научни сарадник

1. I. Stanković, **M. Dašić**, M. Jovanović, and A. Martini,  
"Effects of Water Content on the Transport and Thermodynamic Properties of Phosphonium Ionic Liquids",  
Langmuir 40, 9049 (2024),  
[ISSN 0743-7463, IF2023 3.7, SNIP2023 2.597].

### - Период пре избора у звање научни сарадник

2. **M. Dašić**, K. Gkagkas, and I. Stanković,  
"Influence of Confinement on Flow and Lubrication Properties of a Salt Model Ionic Liquid Investigated with Molecular Dynamics",  
European Physical Journal E 41, 130 (2018),  
[ISSN 1292-8941, IF2018 1.686, SNIP2018 1.239].

## Предавања по позиву са међународног скупа штампана у изводу (М32)

### - Период након избора у звање научни сарадник

1. **M. Dašić**, A. Cammarata, and P. Nicolini,  
"Phonon-Inspired Normal Dynamics of Lattices",  
The 1st Virtual meeting WG2 of COST action CA21101 COSY, 6<sup>th</sup> February 2024,  
\*Belgrade, **Serbia**, (2024).  
\*held online since it was a virtual meeting, but the organizers were from Belgrade, Serbia
2. **M. Dašić**,  
"Computer-Aided Drug Design",  
The Training School of COST action CA21101 COSY, 19-22 September 2023,  
Belgrade, **Serbia**, (2023).

## Саопштења са међународног скупа штампана у целини (категорија М33)

### - Период пре избора у звање научни сарадник

1. **M. Dašić**,  
"Calculation of Geometrical Packing and Binding Energy of Self-Assembled Magnetic Tubular Structures",  
in Proceedings of INFOTEH, 18-20 March 2015,  
Jahorina, **Bosnia and Herzegovina**, (2015).
2. **M. Dašić**,  
"Optimizacija i skaliranje energije 3D struktura samoorganizovanih magnetnih čestica",  
in Proceedings of IEEEESTEC 7<sup>th</sup> Student projects conference, 27<sup>th</sup> November 2014,  
Niš, **Serbia**, (2014).
3. **M. Dašić**,  
"Calculation of Magnetic Field and Supercurrent Distributions of Type-II Superconductors in the Mixed State using Modified London Model",  
in Proceedings of INFOTEH, 19-21 March 2014,

Jahorina, **Bosnia and Herzegovina**, (2014).

4. **M. Dašić**,  
“Comparison of Transfer Matrix (T-matrix) and Coupling of Modes in Time (CMT) Models of Microring Resonator Filters”,  
in Proceedings of INFOTEH, 20-22 March 2013,  
Jahorina, **Bosnia and Herzegovina**, (2013).
5. **M. Dašić** and M. A. Popović,  
“Design of Photonic Microring Resonator Based Wavelength Selective 1 X N Power Splitters”,  
in Proceedings of IEEEESTEC 5<sup>th</sup> Student projects conference, 29<sup>th</sup> November 2012,  
Niš, **Serbia**, (2012).
6. **M. Dašić** and M. A. Popović,  
“Minimum Drop-Loss Design of Microphotonic Microring Resonator Channel Add-Drop Filters”,  
in Proceedings of Telecommunications Forum (TELFOR), 20-22 Nov. 2012,  
Belgrade, **Serbia**, (2012).
7. **M. Dašić**,  
“Ultrafast Carrier Dynamics in QD Semiconductor Optical Amplifiers”,  
in Proceedings of INFOTEH, 21-23 March, 2012,  
Jahorina, **Bosnia and Herzegovina**, (2012).

**Саопштења са међународног скупа штампана у изводу (категорија М34)**

**- Период након избора у звање научни сарадник**

1. **M. Dašić**, J. Fanfrlík, and J. Řezáč,  
“Sensitivity of the Scoring of Protein-Ligand Binding Affinity Predictions on Protein Crystal’s Geometry”,  
3<sup>rd</sup> International Conference on Noncovalent Interactions (ICNI2024), 17-21 June, 2024,  
Belgrade, **Serbia** (2024).
2. **M. Dašić**, A. Cammarata, and P. Nicolini,  
“Normal Dynamics - method development and applications”,  
MecaNano 2nd General Meeting, 1-3 May, 2024,  
Vienna, **Austria**, (2024).
3. I. Stanković, O. Noel, and **M. Dašić**,  
“Exploring influence of water on the friction on two dimensional surfaces”,  
MecaNano 2nd General Meeting, 1-3 May, 2024,  
Vienna, **Austria**, (2024).
4. **M. Dašić**, J. Fanfrlík, and J. Řezáč,  
“Enhancing protein-ligand binding affinity via optimal selection of water molecules”,  
German Physical Society (DPG) Spring Meeting 2024, 17-22 March 2024,  
Berlin, **Germany**, (2024).

5. **M. Dašić**, and I. Stanković,  
“Molecular dynamics study on the impact of water distribution on nanoscopic friction in case of monolayer MoS<sub>2</sub>”,  
German Physical Society (DPG) Spring Meeting 2024, 17-22 March 2024,  
Berlin, **Germany**, (2024).
6. M. Jovanović, **M. Dašić**, and I. Stanković,  
“The simulations of structural, thermodynamical, and mechanical characteristics of the mixture of ionic liquid and water using molecular dynamics: example of [bmim]<sup>+</sup> [PF6]<sup>-</sup> ionic liquid”,  
German Physical Society (DPG) Spring Meeting 2024, 17-22 March 2024,  
Berlin, **Germany**, (2024).
7. **M. Dašić**, and I. Stanković,  
“Molecular Dynamics Investigation of the Nanoscopic Friction on Monolayer MoS<sub>2</sub> in the Presence of Water”,  
STLE Annual Conference, Digital Proceedings, 21-25 May 2023,  
Long Beach, California, **USA**, (2023).
8. **M. Dašić**, and I. Stanković,  
“Influence of Water Quantity on the Nanoscopic Friction on Monolayer MoS<sub>2</sub> Investigated with Molecular Dynamics”,  
The 8th European Nanomanipulation Workshop, 15-17 May 2023,  
Krakow, **Poland**, (2023).
9. **M. Dašić**, and I. Stanković,  
“Nanoscopical Friction on Monolayer MoS<sub>2</sub> in Presence of Water Investigated with Molecular Dynamics”,  
German Physical Society (DPG) Spring Meeting 2023, 26-31 March 2023,  
Dresden, **Germany**, (2023).
10. **M. Dašić**, I. Ponomarev, T. Polcar, and P. Nicolini,  
“Tribological Properties of Selected Vanadium Oxides Investigated with ReaxFF molecular dynamics”,  
German Physical Society (DPG) Spring Meeting 2023, 26-31 March 2023,  
Dresden, **Germany**, (2023).
11. **M. Dašić**, I. Ponomarev, T. Polcar, and P. Nicolini,  
“Tribological Properties of Selected Vanadium Oxide Stoichiometries Studied with Reactive Molecular Dynamics”,  
11th International Conference of The Balkan Physical Union, 28 August - 1 September 2022,  
Belgrade, **Serbia**, (2022).
12. **M. Dašić** and I. Stanković,  
“Influence of the Size of Cation on the Structure and Tribological Properties of Ionic Liquids Studied with Molecular Dynamics”,  
11th International Conference of The Balkan Physical Union, 28 August - 1 September 2022,  
Belgrade, **Serbia**, (2022).
13. I. Stanković, **M. Dašić**, and C. García,  
“Tubular structures of magnetic particles: platform for curvilinear nanomagnetism”,

11th International Conference of The Balkan Physical Union, 28 August - 1 September 2022, Belgrade, **Serbia**, (2022).

14. I. Stanković, and **M. Dašić**,  
“Non-equilibrium molecular dynamics investigation of a model ionic liquid lubricant for heavy-duty applications”,  
11th International Conference of The Balkan Physical Union, 28 August - 1 September 2022, Belgrade, **Serbia**, (2022).
15. **M. Dašić**, I. Ponomarev, P. Nicolini, and T. Polcar,  
“Reactive Molecular Dynamics Study on the Tribological Properties of Selected Vanadium Oxides”,  
5th Users' Conference of IT4Innovations, 9<sup>th</sup> November 2021,  
\*Ostrava, **Czech Republic**, (2021).  
\*held online due to COVID19, but it was supposed to be held in Ostrava, Czech Republic

**- Период пре избора у звање научни сарадник**

16. **M. Dašić**, I. Stanković and K. Gkagkas,  
“Molecular Dynamics Investigation of the Flow and Tribological Properties of a Salt Model Ionic Liquid under Confinement and Imposed Mechanical Deformations”,  
Iberian Meeting on Rheology – IBEREO 2019, 4-6 September 2019,  
Porto, **Portugal**, (2019).
17. **M. Dašić**, I. Stanković and K. Gkagkas,  
“Molecular Dynamics Investigation of a Coarse-Grained Model of Ionic Liquid under Confinement and Shear”,  
The 10<sup>th</sup> Liquid Matter Conference – Liquids 2017, 17-21 July 2017,  
Ljubljana, **Slovenia**, (2017).
18. **M. Dašić** and I. Stanković,  
“Theoretical and Experimental Study of Helices Composed of Spherical Dipoles”,  
The 19<sup>th</sup> Symposium on Condensed Matter Physics – SFKM 2015, 7-11 September 2015,  
Belgrade, **Serbia**, (2015).

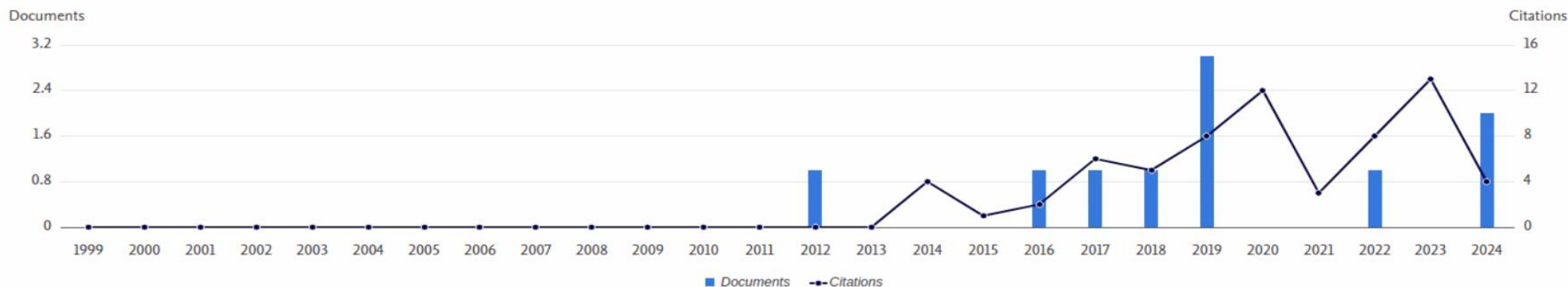
# Citation overview

For 2 authors: Dašić, Miljan • Dasic, Miljan

7 Documents 66 Citations 5 h-index

Date range: 1999 to 2024

Exclude self citations of selected authors
  Exclude self citations of all authors
  Exclude book citations
  Hide documents with 0 citations



Sort by Date (newest)

Documents	Year	<1999	1999	2000	2001	2002	2003	2004	2005	2006	2007	2008	2009	2010	2011	2012	2013	2014	2015	2016	2017	2018	2019	2020	2021	2022	2023	2024	Total
<b>Total</b>		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	4	1	2								66	
1	Effects of Water Content on the Transport a...	2024	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
2	A platform for nanomagnetism-assembled ...	2019	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	8
3	Molecular dynamics investigation of the in...	2019	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	18
4	Influence of confinement on flow and lubri...	2018	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	4
5	Molecular dynamics investigation of a mod...	2017	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	15
6	Structure and cohesive energy of dipolar he...	2016	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	6	
7	Minimum drop-loss design of microphoto...	2012	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	4	1	1							14	

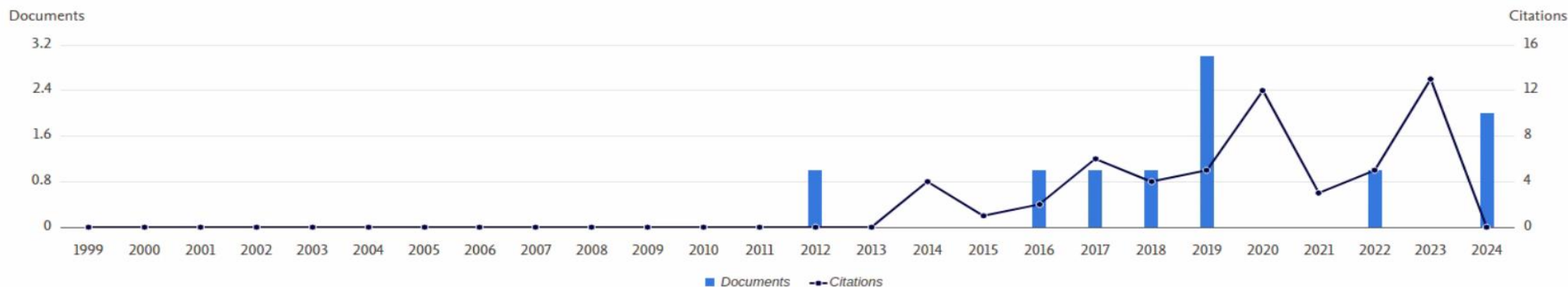
# Citation overview

For 2 authors: Dašić, Miljan • Dasic, Miljan

7 Documents 55 Citations 5 h-index

Date range: 1999 to 2024

Exclude self citations of selected authors
  Exclude self citations of all authors
  Exclude book citations
  Hide documents with 0 citations



Sort by Date (newest)

Documents	Year	<1999	1999	2000	2001	2002	2003	2004	2005	2006	2007	2008	2009	2010	2011	2012	2013	2014	2015	2016	2017	2018	2019	2020	2021	2022	2023	2024	Total
<b>Total</b>		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	4	1	2							55		
1	Effects of Water Content on the Transport a...	2024	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
2	A platform for nanomagnetism-assembled ...	2019	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	8	
3	Molecular dynamics investigation of the in...	2019	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	15	
4	Influence of confinement on flow and lubri...	2018	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2	
5	Molecular dynamics investigation of a mod...	2017	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	11	
6	Structure and cohesive energy of dipolar he...	2016	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	5	
7	Minimum drop-loss design of microphoto...	2012	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	4	1	1							14		

Република Србија  
МИНИСТАРСТВО ПРОСВЕТЕ,  
НАУКЕ И ТЕХНОЛОШКОГ РАЗВОЈА  
Матични научни одбор за физику

Број: 660-01-4/2020-14/8  
27.03.2020. године  
Београд

ИНСТИТУТ ЗА ФИЗИКУ			
ПРИМЉЕНО:		09.06.2020	
Рад.јед.	бр.ј	Арх.шифра	Прилог
0801	490/1		

На основу члана 27. став 1 тачка 1) и члана 76. став 5. Закона о науци и истраживањима („Службени гласник Републике Србије”, бр. 49/2019) и Правилника о поступку, начину вредновања и квантитативном исказивању научноистраживачких резултата истраживача („Службени гласник Републике Србије”, број 24/16, 21/17 и 38/17) и захтева који је поднео

**Институт за физику у Београду**

Матични научни одбор за физику на седници одржаној 27.03.2020. године, донео је

**ОДЛУКУ  
О СТИЦАЊУ НАУЧНОГ ЗВАЊА**

**Др Миљан Дашић**  
стиче научно звање  
Научни сарадник

у области природно-математичких наука - физика

О Б Р А З Л О Ж Е Њ Е

**Институт за физику у Београду**

утврдио је предлог број 209/1 од 11.02.2020. године на седници Научног већа Института за физику у Београду и поднео захтев Матичном научном одбору за физику број 233/1 од 13.02.2020. године за доношење одлуке о испуњености услова за стицање научног звања **Научни сарадник**.

Матични научни одбор за физику на седници одржаној 27.03.2020. године разматрао је захтев и утврдио да именовани испуњава услове из члана 76. став 5. Закона о науци и истраживањима („Службени гласник Републике Србије”, бр. 49/2019) и Правилника о поступку, начину вредновања и квантитативном исказивању научноистраживачких резултата истраживача („Службени гласник Републике Србије”, број 24/16, 21/17 и 38/17) за стицање научног звања **Научни сарадник** па је одлучио као у изреци ове одлуке.

Доношењем ове одлуке именовани стиче сва права која му на основу ње по закону припадају.

Одлуку доставити подносиоцу захтева, именованом и архиви Министарства просвете, науке и технолошког развоја у Београду.

МИНИСТАР

Младен Шарчевић



МАТИЧНИ НАУЧНИ ОДБОР ЗА ФИЗИКУ  
ПРЕДСЕДНИК

проф. др Милан Дамњановић



## Додатни прилози: менторства



Univerzitet u Beogradu  
Fizički fakultet

Simulacije strukturnih, termodinamičkih i mehaničkih  
karakteristika mešavine jonske tečnosti i vode metodom  
molekularne dinamike: primer  $[bmim]^+ [PF_6]^-$  jonske tečnosti

Mentori  
Prof. dr Sunčica Elezović-Hadžić  
*Fizički fakultet*

dr Miljan Dašić  
*Institut za fiziku u Beogradu*

Student  
Mateja Jovanović

## Zahvalnost

Ovaj rad je u potpunosti nastao u Laboratoriji za primenu računara u nauci, Instituta za fiziku u Beogradu, pod rukovodstvom dr Miljana Dašića. Želim da izrazim veliku zahvalnost Miljanu za uvod u kompleksan svet jonskih tečnosti i upotrebe opreme visokih računarskih performansi za naučna istraživanja. Takođe, želim da mu se zahvalim za sveobuhvatnu podršku tokom mog rada na master tezi, posebno zato što me je uputio u dobru naučnu praksu prezentovanja podataka i pisanja izveštaja.



# Analiza magnetnih tubularnih struktura u vertikalnom homogenom magnetnom polju

Mihajlo Srećković

Mentori: Nikola Petreski, Dr Miljan Dašić

## 1 Teorijski uvod

Čestice sa stalnim dipolnim momentom poznate su po svojim samoasemblirajućim osobinama. Magnetne strukture imaju široku primenu u nanotehnologiji (Whitesides i Grzybowski 2002), tako da je od izuzetnog značaja znati kako se one ponašaju. U biologiji, tubularne strukture su relevantni samoasemblirajući objekti koji su pronađeni u nekim vrstama bakterija i u ćelijskim mikrotubulama. Magnetne čestice se spontano mogu rasporediti tako da grade tubularne strukture (Stanković I., Dašić M. i Messina R. 2016.). U ovom radu posmatrana je dinamika magnetnih tubularnih struktura u spoljašnjem vertikalnom homogenom magnetnom polju. U tu svrhu razvijene su simulacije zasnovane na metodu molekularne dinamike u softverskom paketu MATLAB.

### 1.1 Magnetne čestice

Magnetne čestice se mogu definisati svojim dipolnim momentom i načinom na koji on interaguje sa magnetnim poljem. Čestica  $i$  sa dipolnim momentom  $\boldsymbol{\mu}_i$  stavljena u magnetno polje indukcije  $\boldsymbol{B}$  ima potencijalnu energiju

$$U_B^i = -\boldsymbol{\mu}_i \cdot \boldsymbol{B} \quad (1)$$

gde je  $U_B^i$  potencijalna energija interakcije sa magnetnim poljem. Iz jednačine (1) se može primetiti da će čestice težiti da poklope svoje dipolne momente sa magnetnim poljem kako bi minimizovale energiju. Ovo je jedna od bitnijih osobina magnetnih čestica.

Magnetne čestice takođe stvaraju oko sebe magnetno polje, čija se indukcija može odrediti jednačinom

$$\boldsymbol{B}_i(\boldsymbol{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi r^3} \left[ \frac{3\boldsymbol{r}(\boldsymbol{\mu}_i \cdot \boldsymbol{r})}{r^2} - \boldsymbol{\mu}_i \right] \quad (2)$$

gde je  $\boldsymbol{B}_i$  magnetna indukcija polja koju stvara čestica  $i$ ,  $\mu_0$  permeabilnost vakuuma,  $\boldsymbol{r}$  proizvoljan vektor položaja od centra čestice i  $r = |\boldsymbol{r}|$ . Kako čestice stvaraju magnetno polje, druge čestice mogu interagovati s tim magnetnim poljem, to jest dolazi do interakcije između čestica, koja se naziva dipol-dipol interakcija.

Posmatrajmo dve čestice  $i$  i  $j$  na položajima  $r_i$  i  $r_j$  i sa magnetnim momentima  $\mu_i$  i  $\mu_j$ , redom. Čestica  $i$  interaguje sa magnetnim poljem koje stvara čestica  $j$ , što i jeste dipol-dipol interakcija. Potencijalna energija ove interakcije se može naći ubacivanjem jednačine (2) u jednačinu (1), i sređivanjem se dobija izraz:

## Ispitivanje tečno-čvrstog kontakta TM jonskih tečnosti i kristalne podloge metodom molekularne dinamike

*U ovom radu ispitan je uticaj određenih faktora na tečno-čvrsti kontakt jonske tečnosti i podloge. Za jonsku tečnost korišćen je TM model (Tail Model – model sa repom) koji se sastoji od anjona i katjona povezanog sa neutralnim repom. Jednoslojna podloga ima kristalnu strukturu pravilne FCC (Face centered Cubic) III rešetke. Faktori koji su ispitani su asimetrija unutar jonske tečnosti, uticaj međusobne LJ (Lennard-Jones) interakcije između kristalne podloge i tečnosti, kao i uticaj početnog oblika kapljice jonske tečnosti. Posmatrana su dva početna oblika: sfera i kocka. Podloga je elektroneutralna, i Kulonova interakcija ne utiče direktno na tečno-čvrsti kontakt. Indirektni uticaj Kulonove interakcije manifestuje se kroz interakciju anjona i katjona unutar same tečnosti. Uticaj ovih faktora se izražava kroz promenu kohezije i adhezije. Ova promena se demonstrira promenom ugla kvašenja, pomoću kojeg su i izvedeni zaključci o uticaju ispitanih faktora.*

### Teorijski uvod

Jonske tečnosti su tečnosti organskih soli visoke asimetrije. Asimetrija potiče od velike razlike u veličini anjona i katjona, kao i od postojanja neutralnog repa povezanog sa katjonom. Posledice te asimetrije su niska temperatura topljenja i nemogućnost formiranja kristalne strukture (Dašić *et al.* 2019; Hayes *et al.* 2010). Tečnosti koje ćemo koristiti, po asimetriji liče na [BMIM]<sup>+</sup>[PF<sub>6</sub>]<sup>-</sup> i [BMIM]<sup>+</sup>[TFSI]<sup>-</sup> jonske tečnosti. Kod [BMIM]<sup>+</sup>[PF<sub>6</sub>]<sup>-</sup> se očekuje potpuno, a

kod [BMIM]<sup>+</sup>[TFSI]<sup>-</sup> delimično kvašenje (Beat-*tie et al.* 2013; Bou-Malham i Bureau 2010; Wang i Priest 2013). Zbog mogućnosti varijacije velikog broja parametara u strukturi jonske tečnosti, postoji veliki broj različitih jonskih tečnosti. Procenjuje se da je taj broj reda veličine 10<sup>18</sup> (Dold *et al.* 2013). Kvašenje ovih tečnosti potpuno varira u zavisnosti od vrste tečnosti i podloge koju ona kvasi. Parametri za koje ispitujemo uticaj na kvašenje su odnos veličina katjona, anjona i repova, jačina interakcije sa podlogom i početni oblik kapljice. Za simulacije interakcije nije bitna realna veličina atoma, već njihov Van der Valsov (VDW) radijus. To je prečnik sfere do čije površine najbliže može doći drugi atom.

Jedna vrsta interakcije do koje dolazi u simulacijama je Lenard-Džonsova interakcija (Lenard-Jones), u oznaci LJ interakcija (slika 1). Ona predstavlja pojednostavljen matematički model (1) međuatomskog potencijala. Ovako interaguju svi tipovi atoma u simulaciji. Ovaj potencijal zavisi od rastojanja između atoma i njihovih VDW radijusa. Sastoji se iz odbojnog i privlačnog dela (Dašić *et al.* 2019):

$$V = 4e \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (1)$$

gde se prvi član odnosi na odbijanje, a drugi na privlačenje. Oznake su sledeće:

*e* – dubina potencijala. Što je dublji potencijal to je jača interakcija (i odbojna i privlačna). U simulaciji postoje dva različita

---

*Aleksandar Filipović (2002), Kragujevac, učenik 2. razreda Prve kragujevačke gimnazije*  
*Matej Vučković (2002), Beograd, učenik 2. razreda Treće beogradske gimnazije*

*MENTOR: dr Miljan Dašić, Institut za Fiziku, Beograd*

## Додатни прилози: рецензије

Peer review (15 reviews for 10 publications/grants) <span>Sort</span>	
> Review activity for <b>Applied sciences.</b> (1)	Everyone
> Review activity for <b>Coatings.</b> (1)	Everyone
> Review activity for <b>Lubricants.</b> (1)	Everyone
> Review activity for <b>Materials.</b> (3)	Everyone
> Review activity for <b>Metals.</b> (1)	Everyone
> Review activity for <b>Optical and quantum electronics.</b> (1)	Everyone
> Review activity for <b>Polymers.</b> (1)	Everyone
> Review activity for <b>Sustainability.</b> (1)	Everyone
> Review activity for <b>Symmetry.</b> (1)	Everyone
> Review activity for <b>Tribology international.</b> (4)	Everyone

### REVIEW CONFIRMATION CERTIFICATE



We are pleased to confirm that

*Miljan Dašić*

has reviewed 10 papers for the following MDPI journals in the period 2022–2024:  
*Symmetry, Polymers, Sustainability, Materials, Applied Sciences, Coatings, Metals, Lubricants*

*Shu-Kun Lin*

Dr. Shu-Kun Lin, Publisher and President  
Basel, 23 August 2024



MDPI is a publisher of open access, international, academic journals. We rely on active researchers, highly qualified in their field to provide review reports and support the editorial process. The criteria for selection of reviewers include: holding a doctoral degree or having an equivalent amount of research experience; a national or international reputation in the relevant field; and having made a significant contribution to the field, evidenced by peer-reviewed publications.

# Додатни прилози: предавања по позиву

## Training School COST-COSY 2023, Belgrade - CONFIRMED TRAINERS -

To achieve aims of the Training School we have a great team of eminent teachers from Spain, Switzerland, France, Italy, Romania, Sweden and Serbia.

[READ MORE ABOUT COSY](#)



MARÍA PILAR DE LARA-CASTELLS

Institute of Fundamental Physics of the Spanish National Research Council (IFF-CSIC), Madrid, Spain  
(Intermolecular interactions and Clusters)



JIRI VANICEK

Ecole polytechnique fédérale de Lausanne, Lausanne, Switzerland  
(Semiclassical Dynamics and Electronic Spectroscopy)



CRISTINA PUZZARINI

University of Bologna, Department of Chemistry "Giacomo Ciamician", Bologna, Italy  
(Gas-phase Spectroscopy and Astrochemistry)



MAJDI HOCHLAF

Université Gustave Eiffel, COSYS/IMSE, Paris, France  
(Intermolecular Interactions, Clusters and Surfaces and Astrochemistry)



SONJA GRUBIŠIĆ

University of Belgrade, Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy (ICTM), Belgrade, Serbia  
(Grand Canonical Monte Carlo, Force Field development and MOFs)



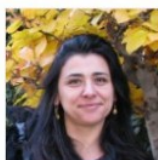
MARTIN QUACK

Physical Chemistry, ETH Zurich, Zurich, Switzerland  
(Quantum Dynamics, Symmetry, and Tunneling)



AATTO LAAKSONEN

Stockholm University, Division of Physical Chemistry, Department of Materials and Environmental Chemistry, Arrhenius Laboratory, Stockholm, Sweden  
(Modern Molecular Modelling and Simulations)



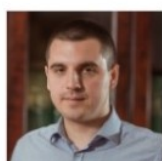
FRANCESCA MOCCI

University of Cagliari, UNICA, Department of Chemical and Geological Science, Cagliari, Italy  
(Classical Dynamics and Coarse-grained models, Nucleic acids)



ANDREI NEAMTU

TRANSCEND Research Center Romania, Iasi, Romania  
(Classical Dynamics, Biomolecules)



MILJAN DAŠIĆ

Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, Czech Academy of Sciences, Prague, Czech Republic;  
Institute of Physics Belgrade, University of Belgrade, Belgrade, Serbia  
(Classical and Reactive Molecular Dynamics)



VLADIMIR SREĆKOVIĆ

Institute of Physics Belgrade, University of Belgrade, Belgrade, Serbia  
(Astrophysics and Physics of Ionosphere)



COST COSY

COST COSY Training School 2023  
19-22 September 2023, Belgrade, Serbia

## Teachers

María Pilar de Lara-Castells	Institute of Fundamental Physics of the Spanish National Research Council (IFF-CSIC), Madrid, Spain email: <a href="mailto:Pilar.deLara.castells@csic.es">Pilar.deLara.castells@csic.es</a>
Jiří Vaníček	Ecole polytechnique fédérale de Lausanne, Lausanne, Switzerland email: <a href="mailto:jiri.vanicek@epfl.ch">jiri.vanicek@epfl.ch</a>
Cristina Puzzarini	University of Bologna, Department of Chemistry "Giacomo Ciamician", Bologna, Italy email: <a href="mailto:cristina.puzzarini@unibo.it">cristina.puzzarini@unibo.it</a>
Majdi Hochlaf	Université Gustave Eiffel, COSYS/IMSE, Paris, France email: <a href="mailto:majdi.hochlaf@univ-eiffel.fr">majdi.hochlaf@univ-eiffel.fr</a>
Sonja Grubišić	University of Belgrade, Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy (ICTM), Belgrade, Serbia email: <a href="mailto:sonja.grubisic@ihm.bg.ac.rs">sonja.grubisic@ihm.bg.ac.rs</a>
Martin Quack	Physical Chemistry, ETH Zurich, Zurich, Switzerland email: <a href="mailto:martin@quack.ch">martin@quack.ch</a>
Aatto Laaksonen	Stockholm University, Division of Physical Chemistry, Department of Materials and Environmental Chemistry, Arrhenius Laboratory, Stockholm, Sweden email: <a href="mailto:aatto@mmk.su.se">aatto@mmk.su.se</a>
Francesca Mocci	University of Cagliari, UNICA, Department of Chemical and Geological Science, Cagliari, Italy email: <a href="mailto:fmocci@unica.it">fmocci@unica.it</a>
Andrei Neamtu	TRANSCEND Research Center Romania, Iasi, Romania email: <a href="mailto:andrei.neamtu@umfiasi.ro">andrei.neamtu@umfiasi.ro</a>
Miljan Dašić	Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, Czech Academy of Sciences, Prague, Czech Republic; Institute of Physics Belgrade, University of Belgrade, Belgrade, Serbia email: <a href="mailto:mdasic@ipb.ac.rs">mdasic@ipb.ac.rs</a>
Vladimir Srećković	Institute of Physics Belgrade, University of Belgrade, Belgrade, Serbia email: <a href="mailto:vlada@ipb.ac.rs">vlada@ipb.ac.rs</a>



<b>THU, Sep 21</b>	
9:30-11:00	<b>Martin Quack (Switzerland)</b> <i>"Molecules in motion: symmetries and primary processes between less than yoctoseconds and more than days"</i>
11:00-11:30	Coffee break
11:30-13:00	<b>Andrei Neamtu (Romania)</b> <i>"Sampling strategies for complex systems: enhanced-sampling simulations for the study of biomolecules"</i>
13:30-15:00	Lunch
15:00-16:30	Practice (Andrei Neamtu)
16:30-17:00	Coffee break
17:00-18:30	<b>Miljan Dašić (Czech Republic)</b> <i>"Computer-aided drug design"</i>

<b>FRI, Sep 22</b>	
9:30-11:00	<b>Jiří Vaniček (Switzerland)</b> <i>"Semiclassical dynamics and electronic spectroscopy"</i>
11:00-11:30	Coffee break
11:30-13:00	Practice (Miljan Dašić)
13:30-15:00	Lunch
15:00-17:00	*Poster session and cocktail
<b>17:00</b>	<b>Closing addresses</b>
17:00-20:00	Free afternoon
20:00-	Social dinner






All lectures will take place in the Lecture Hall "Belgrade panorama" of Palace Hotel (6<sup>th</sup> floor).

\*Poster session will be held in the Banquet Hall, 1<sup>st</sup> floor (Hotel Palace)

## CONTENT

### Invited speakers:

- |     |                                     |                                                                                                                    |
|-----|-------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| L1  | <b>María Pilar de Lara-Castells</b> | Superfluid helium droplet-mediated surface-deposition of neutral and charged silver atomic species                 |
| L2  | <b>Hochlaf Majdi</b>                | Probing interfacial interactions occurring between gas – nanomaterials pores and applications                      |
| L3  | <b>Olga Lushchikova</b>             | Exploring CO <sub>2</sub> interactions with Cu clusters in superfluid helium nanodroplets                          |
| L4  | <b>Dragan Popović</b>               | Protein environment – cofactor interactions in redox protein systems                                               |
| L5  | <b>Petra Čechová</b>                | Mechanistic Insights into Interactions Between Ionizable Lipid Nanodroplets and Biomembranes                       |
| L6  | <b>Kęstutis Aidas</b>               | Structural and NMR Properties of Ionic Liquid Systems Modelled by an Integrated MD-QM/MM Approach                  |
| L7  | <b>Ivana Đorđević</b>               | Modelling of Chimera H1sD2 Protein Adsorption on Gold Nanoparticle Surface                                         |
| L8  | <b>Jógvan Magnus Haugaard Olsen</b> | MiMiC: A High-Performance Framework for Multiscale Modeling in Computational Chemistry                             |
| L9  | <b>Anela Ivanova</b>                | Folate-based targeted delivery of doxorubicin within drug-peptide complexes – a molecular dynamics description     |
| L10 | <b>Nemanja Trišović</b>             | Challenging Goals in Developing Organic Self-assembled Materials: the Case of Liquid Crystals                      |
| L11 | <b>Jorge Alonso de la Fuente</b>    | Accurate rotational spectroscopy of PH <sup>+</sup> molecule                                                       |
| L12 | <b>Igor Stanković</b>               | Molecular Dynamics of Water Molecules on Multilayer Graphene Nanoribbons                                           |
| L13 | <b>Sergiy Perepelytsya</b>          | Anomalous bending of spermidine <sup>3+</sup> when confined on DNA duplex surface                                  |
| L14 | <b>Patryk Jasik</b>                 | Femtosecond laser impulse optimization for electronic excitations in the NaRb molecule                             |
| L15 | <b>Miljan Dašić</b>                 | Phonon-Inspired Normal Dynamics of Lattices                                                                        |
| L16 | <b>Francesca Mocci</b>              | Exploring Intricate Interactions: A Comprehensive Study of Novel Bis-Acridine Orange Dyes with Double-Stranded DNA |
| L17 | <b>Sandra Gómez</b>                 | Photoexcited quantum dynamics in the condensed phase                                                               |
| L18 | <b>Carlo Maria Carbonaro</b>        | Combining computational and experimental results to correlate structure and properties in Carbon Dots              |

<b>Subject</b> Poziv za gostovanje na događaju "Dani fotonike"	 
<b>From</b> Николина Братић 	
<b>To</b> mdasic@ipb.ac.rs 	
<b>Cc</b> uofbelgradeosastudentchapter@gmail.com 	
<b>Date</b> 2023-12-06 13:49	

Poštovani Miljane Dašiću,

Moje ime je Bratić Nikolina i pišem Vam ispred organizacionog tima događaja "Dani Fotonike" koji će se održati 26. i 27. decembra na Elektrotehničkom fakultetu Univerziteta u Beogradu, u organizaciji Optica student chapter Univerziteta u Beogradu.

Zadovoljstvo mi je da Vas ispred organizacije pozovem da budete jedan od govornika na našem događaju. Prepoznali smo Vaš izuzetan doprinos u oblasti fotonike i smatramo da biste bili inspirativan govornik za sve zainteresovane studente našeg Univerziteta. Ukoliko ne budete u mogućnosti da fizički prisustvujete događaju, rado bismo Vam omogućili da se predstavite putem MS Timsa.

Tema Vašeg govora može obuhvatiti Vaše istraživačko iskustvo u oblasti fotonike i put koji ste prešli do svoje trenutne pozicije. Smatramo da Vaša priča može biti izuzetno inspirativna za studente i ostale učesnike događaja. Cilj ovog skupa je popularizacija fotonike u Srbiji, a Vaše iskustvo i znanje bi sigurno doprineli ostvarenju tog cilja.

Molimo Vas da nam potvrdite svoju dostupnost i interesovanje za učešće u najkraćem mogućem roku, kako bismo pravilno isplanirali raspored govornika i logistiku događaja.

Ukoliko imate dodatna pitanja ili Vam je potrebno više informacija, slobodno me kontaktirajte.

Radujemo se Vašem učešću na "Danima Fotonike" i deljenju Vašeg znanja sa našom zajednicom!

S poštovanjem,

Bratić Nikolina  
Oraginizacioni tim "Dani fotonike"  
Optica Student Chepter Univerziteta u Beogradu



# DANI FOTONIKE 26-27.12.2023.

UPOZNAJ SE SA CELIM  
SPEKTROM MOGUĆNOSTI!

- Kvantni Računari
- Biosenzori
- Bioreaktori
- Integrisana Fotonika
- Spektroskopija
- Karijerni put u fotonici

Registruj se kako bi  
prisustvovao događaju!

**OPTICA**  
Formerly OSA



**26.12. u 17h sala 65**

## PANEL SESIJA

**Izazovi u fotonici: Akademija VS Industrija**

Učesnici:

Specijalni gosti iz naše i strane industrije i  
akademije!

**26.12. u 18-20h**

📍 **Sala 55**

Milan Mašanović

*Freedom Photonics*

Ozren Petrović

*LIGENTEC*

Milan Sinobad

*DESY*

Marija Trajković

*Eindhoven Hendrik*

*Casimir Institute*

Biljana Stankov

*IPB*

**27.12. u 18-20:30h**

📍 **Sala 59**

Miljan Dašić

*IOCB Prague*

Željko Janićijević

*Helmholtz-Zentrum*

*Dresden-Rossendorf*

Milana Lalović

*CERN*

Radoica Draškić

*Tenderly*

Isidora Teofilović

*DTU Photonics*

Marina Radulaški

*UC Davis*

## Molekularna Dinamika (MD)

dr Miljan Dašić

*Laboratorija za primenu računara u nauci,  
Centar za izučavanje kompleksnih sistema,  
Institut za fiziku Beograd*

INSTITUTE OF PHYSICS  
BELGRADE



Istraživačka Stanica Petnica  
Zimski seminar fizike 1  
Jun 2022.

Petnica



## Uvod u Molekularnu Dinamiku (MD) Primena MD na tribološke karakteristike vanadijum oksida

dr Miljan Dašić

*Laboratorija za primenu računara u nauci,  
Centar za izučavanje kompleksnih sistema,  
Institut za fiziku Beograd*

INSTITUTE OF PHYSICS  
BELGRADE



Istraživačka Stanica Petnica  
Letnji seminar fizike 2  
Jul 2022.

Petnica





**Додатни прилози: награде**

**IEEEESTEC**  
5<sup>th</sup> Student projects  
conference

# BEST PAPER AWARD

for paper

*Design of Photonic Microring-Resonator  
Based Wavelength Selective  
1 x N Power Splitters*

by

*M. Dašić and M. A. Popović*

Organized By:  
EESTEC LC Niš  
IEEE Student Branch Niš  
Faculty of Electronic Engineering Niš

With the cooperation of:  
IEEE Serbia and Montenegro section  
IEEE Electron Devices/Solid-State Circuits Chapter  
IEEE Microwave Theory and Techniques Chapter



Conference Secretary





## IEEEESTEC Student project conference (2014)

Danijel Danković

The seventh student conference "IEEEESTEC 7th Student project conference" was held on November 27, 2014 at the Faculty of Electronic Engineering in Niš (<http://ieeee.eafak.ni.ac.rs/>). The conference was organized by the student branch of IEEE SB Niš, IEEEESTEC LC Niš and Faculty of Electronic Engineering in Niš, in cooperation with IEEE Serbia and Montenegro Section, IEEE Electron Devices / Solid-State Circuits Chapter and IEEE Microwave Theory and Techniques Chapter.

At the meeting of IEEE SB Niš and IEEEESTEC LC Niš held at the end of March 2014, the initiative for organizing the conference "IEEEESTEC 7th Student project conference" was supported. The IEEE Section Serbia-Montenegro has supported this initiative.

We sent a call for the conference to authors of papers from previous conference, all student organizations in Serbia, student branches of IEEE, members of the IEEE Section Serbia and Montenegro. The total number of received papers is 48 (in the field of: electronics, microelectronics, telecommunications, automatics, power engineering, computing and informatics, physics, student mobility etc.). All papers have passed the review phase, with a minimum of five reviews for each paper. In the review process, 38 teachers and assistants of the Faculty of Electronic Engineering in Niš helped us. Based on the received reviews, the three best rated papers were selected:

### First place

Paper: Programming LED cubes using Raspberry microcomputers  
 Authors: A. Kostić, D. Aleksic  
 Institution: Faculty of Mathematics in Belgrade - Astrophysics, Faculty of Science and Mathematics, Niš

### Second place

Paper: Wordarium - an application for interactive learning of foreign words  
 Authors: P. Antić, P. Živanović, M. Janković  
 Institution: Faculty of Electronic Engineering, Niš

### Third place

Paper: Optimization and scaling of energy of the 3D structure of self-organized magnetic particles  
 Authors: M. Dašić  
 Institution: University of Belgrade, Institute of Physics, Laboratory for Computer Science in Science

## 6·1 Support to Young People

As a socially responsible company that strives to contribute to the development of the communities in which it operates, Erste Bank is primarily focused on developing young people. We see young people as a driving force of the society and as our present and future customers, colleagues and partners. We developed different support mechanisms just for them, focusing primarily on their financial education, empowerment and independence, development of their talents and leadership skills and their orientation towards further development of society.

### Seventeen New Members of the SUPERSTE Club

In 2014, for the seventh consecutive time, Erste Bank organised a competition in search for talented young people whom it awards as part of the SUPERSTE Club. The awards are intended for young people aged 16 to 27 years who achieve exceptional results in the areas they engage in and who spread a positive impact on the society.

In 2014, 151 valid applications were submitted to the SUPERSTE Club competition from almost 60 towns in Serbia, and 17 most talented applicants were given recognitions and cash awards.

The total award amount was RSD 1.5 million. The winners of the main awards got RSD 200,000 each on Erste Bank Youth Cards. The Ljubiša Rajić special award for social activism also included a cash award of RSD 100,000, while those awarded based on public voting got RSD 50,000 each RSD on Erste Bank Youth Cards.

In the past six years, the Bank awarded 71 talented and creative young people with the total amount of RSD 7 million. The project has been implemented from the very beginning in cooperation with the Trag Foundation (the former Balkan Community Initiatives Fund – BCIF) and with support of the Ministry of Youth And Sport of the Republic of Serbia.



### Award Winners

- The Ljubiša Rajić special award for social activism was presented to Maša Davidović (1990), National Coordinator for Human Rights and Peace (IFMSA-Serbia)
- The main award in the natural sciences, engineering and technology category went to Dušan Dimić (1990), who graduated from the Faculty of Physical Chemistry of the University of Belgrade.
- The main award in the social sciences and humanities category went to Maša Mišković (1991), winner of the Gold Medal "for outstanding achievements in learning and acquiring knowledge".
- Two main awards in the arts category went to Irena Josifoski (1996), who has been playing cello since she was five years old, and Ivan Marković (1989), who took part in many festivals in Europe with his solo works and as director of photography.

By public voting, four more awards in the natural sciences, engineering and technology category were given to Ana Stanojević (1990), Stefan Hačko (1993), Miljan Dašić (1990) and Vladimir Petrović (1991). Based on public voting, Dušan Jovčić (1992), Nadežda Tonić (1988), Rada Mašić (1988) and Dragana Vasiljević (1989) were awarded in the social sciences and humanities category. In the arts category, the public also selected Nikola Peković (1991), Dušan Sretović (1995), Nikola Čirić (1992) and Strahinja Pavlović (1996), who distinguished themselves with their work in the arts.

INSTITUTE OF PHYSICS BELGRADE
SCIENTIFIC COMPUTING LABORATORY

- Home
- About Us
- People
- Research
- Publications
- Infrastructure
- Projects
- Activities
- Promo Material
- Contact SCL
- Links
- Search SCL

### Miljan Dašić Wins IPB's Student Prize


Monday, 20 July 2020

SCL's Miljan Dašić has won the IPB's Student Prize for the best doctoral thesis completed at IPB during 2019. The award was made for a high-quality research that enables understanding of Modeling the Behaviour of Confined Dipolar and Ionic Systems. The research was conducted under supervision of Dr. Igor Stanković and has resulted in five publications in international journals. The members of the Prize Committee were Dr. Marija Mitrović Dankulov, Dr. Branislav Cvetković and Dr. Nenad Vranješ.

We congratulate Miljan on this achievement.

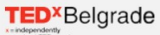
News

- 30 May 2024**  
SCL Online Seminar by Jasper van Wezel
- 28 May 2024**  
IPB Seminar by Dejan Stojković
- 23 May 2024**  
SCL Online Seminar by Doron Cohen
- 16 May 2024**  
IPB Colloquium by Matej Krajnc
- 13 May 2024**  
SCL Seminar by Maxim Efremov
- 25 April 2024**  
SCL Online Seminar by Hareram Swain
- 18 April 2024**  
SCL Seminar by Veljko Janković
- 04 April 2024**  
SCL Seminar by Petar Mitrić



SCIENTIFIC  
COMPUTING  
LABORATORY

SCL © 2004–2024



INSTITUTE OF PHYSICS BELGRADE
SCIENTIFIC COMPUTING LABORATORY

- Home
- About Us
- People
- Research
- Publications
- Infrastructure
- Projects
- Activities
- Promo Material
- Contact SCL
- Links
- Search SCL

### SCL's M. Dašić wins an award from Chamber of Commerce and Industry of Serbia

Thursday, 23 December 2021

SCL's researcher Miljan Dašić won an annual award for best PhD theses with applications in industry for the 2018/19 academic school year, awarded by the Chamber of Commerce and Industry of Serbia. The ceremony was held in the seat of the Chamber of Commerce and Industry of Serbia in Belgrade, on Thursday 23rd December 2021. M. Dašić's PhD thesis entitled


**Modeling the Behaviour of Confined Dipolar and Ionic Systems** ([link](#))

was done at SCL under the mentorship of Dr Igor Stanković, in the research area of computational nanotribology. The main contributions include determining connections and consequences between structure and behaviour in classical systems of nanoparticles and molecules with long-range interactions.

This thesis was one of the 11 selected PhD theses for the award that recognizes novel solutions and significant contributions to industry, science, society and economy. However, due to the epidemic-related restrictions, this year the award was given for the best theses defended in the past two academic school years. A total number of 37 PhD theses, that came from 23 different faculties and 6 universities of the Republic of Serbia, was considered for the award.


News

- 30 May 2024**  
SCL Online Seminar by Jasper van Wezel
- 28 May 2024**  
IPB Seminar by Dejan Stojković
- 23 May 2024**  
SCL Online Seminar by Doron Cohen
- 16 May 2024**  
IPB Colloquium by Matej Krajnc
- 13 May 2024**  
SCL Seminar by Maxim Efremov
- 25 April 2024**  
SCL Online Seminar by Hareram Swain
- 18 April 2024**  
SCL Seminar by Veljko Janković
- 04 April 2024**  
SCL Seminar by Petar Mitrić



SCIENTIFIC  
COMPUTING  
LABORATORY

SCL © 2004–2024



**Subject** COST Action CA21121 - Approval of application and Grant letter for ITC Conference grant E-COST-GRANT-CA21121-723b5467 - Dr Miljan Dašić  
**From** COST Association Notification  
**To** Miljan Dašić  
**Cc** Marc Legros, Rose-Marie Tauzin-Melendo  
**Date** 2024-06-04 19:02



Dear Dr Miljan Dašić,

Your application for a ITC Conference Grant with the following details:

- COST Action: CA21121
- Reference: E-COST-GRANT-CA21121-723b5467
- Grant requested: 1000.00 EUR
- Grant awarded: 1000.00 EUR
- Dates: 22/09/2024 - 27/09/2024

was approved by the MC of the COST Action.

Please find below the link for the Grant Letter that outlines your rights and duties and those of the Action Grant Holder.

<https://e-services.cost.eu/activity/grants/723b5467-1e46-438e-879f-a5f7201df453/download/105903>

A user guide providing an overview of the process is available here: [https://www.cost.eu/grants\\_userguide](https://www.cost.eu/grants_userguide). For further information about this procedure, please contact us or the Grant Awarding Coordinator Dr Marc Legros ([marc.legros@cemes.fr](mailto:marc.legros@cemes.fr)).

Participant grants are non-commercial transactions, therefore, claims as such are not subject to V.A.T deduction. Taxes normally due or applicable with respect to the payment of the grant are not to be deducted from amounts payable to participants. It is the responsibility of each participant to ensure that all amounts that they receive from COST funding are compliant with their national tax rules and obligations.

We thank you for your cooperation.

Kind regards,

Ms Rose-Marie Tauzin-Melendo

E-mail: [ghm-cost@cemes.fr](mailto:ghm-cost@cemes.fr)  
Phone: 05 62 25 78 19

Best regards,

COST Association

## Додатни прилози: сертификати

Deutsche Physikalische Gesellschaft e.V.

GESCHÄFTSSTELLE  
Hauptstraße 5  
53604 Bad Honnef  
Tel. (0 22 24) 92 32 - 0  
Fax (0 22 24) 92 32 - 50  
dpg@dpg-physik.de  
<http://www.dpg-physik.de>



Dr.  
Miljan Dasic  
Scientific Computing Laboratory  
Institute of Physics  
University of Belgrade  
Pregrevica 118  
11080 Belgrade

Contact:  
Beatrice Hensel  
[hensel@dpg-physik.de](mailto:hensel@dpg-physik.de)  
Tel: +49 2224-9232-10  
Fax: +49 2224-9232-50

### CONFIRMATION

This is to confirm the participation of

**Dr. Miljan Dasic**

**at the DPG Spring Meeting in Dresden (SKM23), March 26 - 31, 2023**

with the talk:

**"Nanosopic Friction on Monolayer  $MoS_2$  in Presence of Water Investigated with Molecular Dynamics"**

and the poster:

**"Tribological Properties of Selected Vanadium Oxides Investigated with *ReaxFF* molecular dynamics"**

The conference fee of 220,00 € has been paid.

Beatrice Hensel  
Conference Management  
Deutsche Physikalische Gesellschaft e. V.

Bad Honnef, March 31, 2023





## CERTIFICATE OF ATTENDANCE

awarded to

**MILJAN DAŠIĆ**

for successful completion of the online PRACE Training Centre course

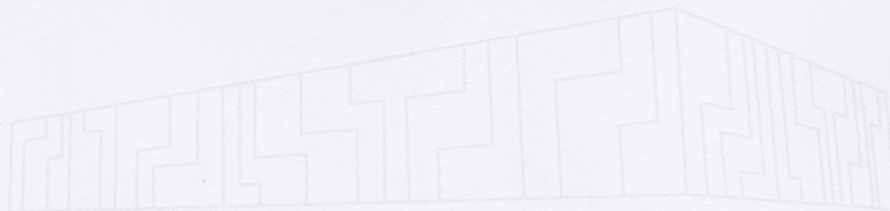
### Introduction to MPI

May 25-27, 2021

on behalf of the organizing committee

Ing. Karina Pešatová, MBA

Head of Training and Education Department, IT4Innovations National Supercomputing Center







## CERTIFICATE OF ATTENDANCE

awarded to

**Miljan Dašić**

for successful completion of the online PRACE Training Centre course

**Advanced MPI**

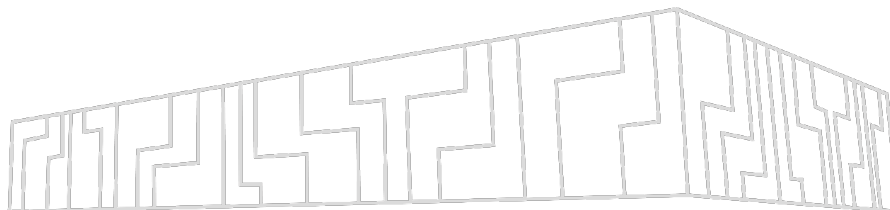
October 19 - 21, 2021

---

on behalf of the organizing committee

Ing. Karina Pešatová, MBA

Head of Training and Education Department, IT4Innovations National Supercomputing Center



This event was partially supported by The Ministry of Education, Youth and Sports from the Large Infrastructures for Research, Experimental Development and Innovations project "e-Infrastruktura CZ – LM2018140" and partially by the PRACE-6IP project - the European Union's Horizon 2020 research and innovation programme under grant agreement No. 823767. This work was also partially supported by the SGC grant No. SP2020/21 "Infrastructure research and development of HPC libraries and tools II", VŠB - Technical University of Ostrava, Czech Republic.

# BPU11 CONGRESS

11th International Conference of The Balkan Physical Union  
28 August – 1 September 2022, Belgrade, Serbia

THIS CERTIFIES THAT

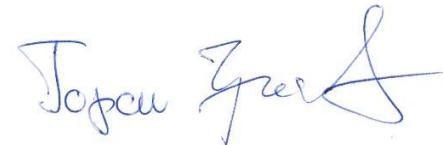
# MILJAN DAŠIĆ

he/she presented contribution **S04-AMP-100** with title  
***Tribological Properties of Selected Vanadium Oxide Stoichiometries Studied with Reactive Molecular Dynamics*** as **Oral presentation.**



---

Prof. Dr. Dragoljub D. Dimitrijević  
Chair of the BPU11 LOC



---

Prof. Dr. Goran Djordjevic  
President of the BPU

# BPU11 CONGRESS

11th International Conference of The Balkan Physical Union  
28 August – 1 September 2022, Belgrade, Serbia

THIS CERTIFIES THAT

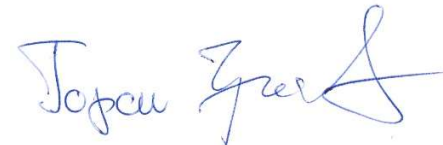
# MILJAN DAŠIĆ

he/she presented contribution **S06-CMPSP-102** with title  
*Influence of the Size of Cation on the Structure and Tribological Properties of Ionic Liquids Studied  
with Molecular Dynamics* as **Oral presentation.**



---

Prof. Dr. Dragoljub D. Dimitrijević  
Chair of the BPU11 LOC



---

Prof. Dr. Goran Djordjevic  
President of the BPU