

Милош Симић
Ј.С.

**НАСТАВНО НАУЧНОМ ВЕЋУ ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКОГ
ФАКУЛТЕТА И ВЕЋУ ЗА ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКЕ НАУКЕ
УНИВЕРЗИТЕТА У КРАГУЈЕВЦУ**

На седници Наставно-научног већа Природно-математичког факултета у Крагујевцу одржаној 26. јануара 2022. године (број одлуке: 60/XIV-2), предложени смо, а на седници Већа за природно-математичке науке Универзитета у Крагујевцу одржаној 04.02.2022 године (број одлуке: IV-01-56/11), именовани смо за чланове Комисије за подношење извештаја за оцену научне заснованости теме и испуњености услова кандидата **Марка Д. Радовановића** за израду докторске дисертације под насловом: „**СИНТЕЗА И КВАНТНО-МЕХАНИЧКИ ЗАВИСНА ЕВАЛУАЦИЈА ЛИГАНДНОГ ПОЉА НЕКИХ КОМПЛЕКСА РОДИЈУМА(III) СА ЛИГАНДИМА ЕДТА ТИПА**“.

На основу података којима располажемо подносимо следећи

ИЗВЕШТАЈ

1. Научни приступ проблему предложеног нацрта докторске дисертације и процена научног доприноса крајњег исхода рада

Координовање молекула лигананда са металним јоном доводи до промене у самим лигандима прилагођавајући их сфери централног металног јона. Молекул идеалне геометрије (идеални валенциони или торзиони углови, дужине веза, Van der Waals-ови радијуси) експериментално никада није добијен. Одступање од идеалне геометрије се јавља као последица интеракција између атома у молекулу које доводе до дисторзије и дестабилизације тог молекула. Структура комплексног једињења је резултат међусобног прилагођавања тих интеракција при постизању минималне дисторзије и минималне дестабилизације. У том процесу долази и до прилагођавања електронске структуре централног металног јона том и таквом лигандном окружењу. Успостављање корелације између електронске структуре комплекса и његове геометрије је веома битно за разумевање макроскопских карактеристика комплекса. Наизглед занемарљиве промене у првој координационој сфери у виду позиција, дужина и углова метал-лиганд веза, резултују значајним променама у енергији и распореду електронских стања.

Велики број структурно сличних комплекса прелазних метала са лигандима едта типа представља одговарајућу подлогу за евалуацију електронске структуре а тиме и бољи увид у природу настанка и особине ових комплексних једињења.

Имајући у виду наведене чињенице у оквиру предложене теме за докторску дисертацију, предвиђена је детаљна теоријска анализа серије комплекса родијума са лигандима edta и 1,3-pdta типа као и синтеза и карактеризација комплекса овог типа који до сада нису добијени. У поменути серију спадају и комплекси са пента кординованим лигандима и једним монодентатним супституентом (H_2O или Cl^-) и сви геометријски изомери који произилазе из овог начина координације.

У оквиру ове докторске дисертације направиле се база података карактеристика свих до сада синтетисаних комплекса Rh-edta типа. Разноврсност великог броја комплекса и

изомера који се могу наградити при пентадентатној и хексадентатној координацији десет лиганада наше серије (edta, ed3ap, eddadp, eda3p, edtp, 1.3-pdta, 1.3-pd3ap, 1.3-pddadp, 1.3-pda3p, 1.3-pdtp) је разлог због ког је овај тип комплекса погодан за квантно-механичку евалуацију лигандног поља која је такође обухваћена планом ове дисертације. На основу детаљне теоријске анализе вршиће се карактеризација комплекси по њиховој стабилности и параметрима лигандног поља и на основу резултата дати процена о комплексима који се евентуално могу очекивати при синтези.

Веза са досадашњим истраживањима

Марко Д. Радовановић је члан истраживачке групе др Зорана Матовића у оквиру института за хемију Природно-математичког факултета у Крагујевцу, која се бави синтезом, карактеризацијом, рачунарским симулацијама, теоријским прорачунима и испитивањем биолошке активности комплекса прелазних метала. Предмет научно-истраживачког рада Марка Д. Радовановића у оквиру поменуте групе су синтеза и карактеризација комплекса родијума(III) са лигандима edta типа и рационализација електронске и геометријске структуре посредством различитих теоријских метода. До сада је група професора Зорана Матовића објавила више радова у оквиру којих је синтетисала и окарактерисала неколико комплекса прелазних метала са edta типом лиганда и одрадила теоријску евалуацију електронске структуре тих комплекса. У оквиру ове докторске дисертације предвиђена је даља анализа комплекса родијума са лигандима edta типа, како експериментална тако и теоријска.

2. Образложење предмета, метода и циља који уверљиво упућују да је предложена тема од значаја за развој науке

Предмет, циљеви и хипотезе ове дисертације обухватају следеће:

- Солидан број синтетисаних и X-гау окарактерисаних комплекса представља добар материјал за успостављање погодне методе за оптимизацију и квантно-механичку евалуацију лигандног поља овог типа комплекса.
- Детаљан увид у енергетику стабилности и енергетику стабилизације лигандног поља комплекса може дати увид у резлоге за фаворизацију неког од изомера наспрам другим при синтези. Са тим у вези се може дати и евентуална претпоставка о прилагођавању реакционих услова како би погодвали формирању неког од изомера.
- Прикупљање базе података синтетисаних и окарактерисаних комплекса Rh-edta типа.
- Одабир погодне квантно-механичке методе за оптимизацију комплекса.
- Одабир погодне квантно-механичке методе за евалуацију лигандног поља.
- Детаљна анализа и провера усаглашености теоријских и експерименталних података.
- Анализа прикупљених података и претпоставка о потенцијално могућим комплексима који се у складу са теоријским резултатима могу очекивати при синтези.
- Синтеза комплекса већ постојећом или претпостављеном методом.

- Карактеризација комплекса применом елементалне микроанализе, различитих спектроскопских техника као и масене спектроскопије.
- Провера валидности одабраних квантно-механичких метода по усаглашености са добијеним резултатима карактеризације новосинтетисаних комплекса.

Методe истраживања

Карактеризација једињења захтева коришћење метода елементалне микроанализе, инфрацрвене, UV-Vis спектроскопије, ^1H и ^{13}C нуклеарно-магнетно-резонанционе спектроскопије и рендгенске структурне анализе. Теоријско проучавање у оквиру ове докторске дисертације обухвата различите квантно-механичке методе и методе функционала густине које се користе за рационализацију електронске и геометријске структуре. Неке од метода коришћених су: енергетско декомпозициона анализа (EDA), метода природних везујућих орбитала (NBO) и метода заснована на комбинацији теорије лигандног поља и теорије функционала густине (LFDFT).

Оквирни садржај докторске дисертације

У оквиру ове докторске дисертације биће описани до сада публиковани резултати из ове области, као и значај и циљ овог истраживања. У Општем делу докторске дисертације биће приказан значај комплекса родијума и edta лиганда, као и њихова примена у различитим доменима науке и индустрије. Такође ће бити приказана повезаност геометрије са електронском структуром комплекса и значај њихових међусобних односа, са посебним нагласком на утицај геометрије на параметре лигандног поља. У Експерименталном делу дисертације биће описане квантно-механичке методе које ће бити коришћене за рационализацију постојећих експерименталних података и предикцију недостајућих. У овом делу дисертације биће описани и поступци за синтезу нових Rh-edta комплекса, као и методе за њихову карактеризацију. У делу дисертације који се односи на Резултате и дискусију биће приказана усаглашеност експерименталних резултата са резултатима наше теоријске предикције. Биће дата детаљна анализа теоријских резултата и на основу њих претпоставка о потенцијално могућим комплексима који се могу очекивати при синтези. Такође у овом делу биће приложени резултати кристалографске карактеризације новосинтетисаних комплекса, резултати њихове UV карактеризације и фитовање тих резултата са теоријски претпостављеним.

3. Образложење теме за израду докторске дисертације које омогућава закључак да је у питању оригинална идеја или оригиналан начин анализирања проблема

Увидом у научна истраживања и резултате кандидата Марка Д. Радовановића, Комисија закључује да је предложена тема докторске дисертације **„СИНТЕЗА И КВАНТНО-МЕХАНИЧКИ ЗАВИСНА ЕВАЛУАЦИЈА ЛИГАНДНОГ ПОЉА НЕКИХ КОМПЛЕКСА РОДИЈУМА(III) СА ЛИГАНДИМА ЕДТА ТИПА“** оригинална идеја.

4. Усклађеност дефиниције предмета истраживања, основних појмова, предложене хипотезе, извора података, методе анализе са критеријумима науке уз поштовање научних принципа у изради коначне верзије докторске дисертације

Предмет истраживања ове докторске дисертације су комплекси родијума са лигандима edta типа, њихова експериментална и теоријска анализа, као и синтеза појединих до сада неизолованих комплекса. Детаљан увид у геометрије, стабилности и електронске структуре ових комплекса нам омогућава да изведемо закључке о законитостима које прате формирање комплекса и особинама које из њих проистичу. У циљу добијања комплекса погодних карактеристика за одређену намену потребно је имати увид у електронску структуру и међусобан однос електронске и геометријске структуре. Са тим у вези је и предмет ове докторске дисертације у смислу детаљног теоријског и експерименталног изучавања природе комплекса Rh-edta типа. Теоријским методама ће се у оквиру ове дисертације извршити карактеризација овог типа комплекса по хемијски смисленим карактеристикама. Извешће се закључак о комплексима које је потенцијално могуће добити и обавиће се синтеза и карактеризација истих. На овај начин ћемо покушати да прикажемо потпуније усаглашеност теорије и експеримента на већем броју комплекса које узимамо у разматрање. У циљу добијања већег броја података за поређење са теоријским, вршиће се различите спектроскопске анализе. По претходно наведеном предмет истраживања је јасно дефинисан и у складу са критеријумима науке.

5. Предложени коментори израде докторске дисертације

Институт за хемију Природно-математичког факултета Универзитета у Крагујевцу је за коменторе ове докторске дисертације предложио др Зорана Д. Матовића, редовног професора Природно-математичког факултета Универзитета у Крагујевцу и др Матију Златара, вишег научног сарадника на Институт за хемију, технологију и металургију Универзитета у Београду.

Образложење: Професор др Зоран Д. Матовић се бави истраживањима из уже научне области Неорганска хемија, и до сада је публиковао радове у реномираним часописима са SCI листе, као и већи број саопштења на међународним и националним научним конференцијама. Предмет његовог истраживања је синтеза и карактеризација комплекса прелазних метала са лигандима edta типа, и рачунарска симулација молекулских система. На основу наведених чињеница, а имајући у виду циљеве и очекиване резултате ове дисертације, сматрамо да др Зоран Матовић испуњава услове за коментора ове докторске дисертације.

Др Матија Златар се бави истраживањем из уже научне области теоријска хемија и до сада је публиковао радове у реномираним научним часописима са SCI листе, као и већи број саопштења на националним и међународним научним конференцијама. У оквиру својих истраживања бави се испитивањем стабилности, електронске и геометријске структуре комплекса прелазних метала са аспекта различитих метода заснованих на теорији функционала густине. На основу наведених чињеница, имајући у виду циљеве и очекиване резултате ове дисертације, сматрамо да др Матија Златар испуњава услове за коментора ове докторске дисертације.

Научна област докторске дисертације

Предложена докторска дисертација припада ужој научној области Неорганска хемија.

Научна област чланова комисије

Чланови комисије се баве истраживањима у областима Неорганске и компјутерске хемије. Др Зоран Д. Матовић (коментор) је редовни професор на Природно-математичком факултету Универзитета у Крагујевцу, др Матија Златар (коментор) је виши научни сарадник на Институту за хемију технологију и металургију у Београду, др Биљана Петровић је редовни професор на Природно-математичком факултету Универзитета у Крагујевцу.

6. Кратка биографија кандидата

Марко Д. Радовановић рођен је 29. априла 1992. године у Крагујевцу. Основно и средњошколско образовање стекао је у Крагујевцу. Студије хемије (смер истраживање и развој) уписао је школске 2011/12. године на Природно-математичком факултету, Универзитета у Крагујевцу, а дипломирао је септембра 2017. године са просечном оценом 8,55. На истом факултету, школске 2017/18. године, уписао је мастер студије хемије у оквиру којих је положио све програмом предвиђене испите са просечном оценом 9,89. Мастер рад под насловом: „Структурна и МП2 енергетска анализа комплекса родијума(III) са лигандима ЕДТА-типа“ одбранио је септембра 2018. Докторске студије (смер неорганска хемија) уписао је школске 2018/19. године на Природно-математичком факултету, Универзитета у Крагујевцу. Почиње са радом на Природно-математичком факултету, Универзитета у Крагујевцу 2018. године као истраживач приправник и учествује у извођењу практичне наставе из предмета Основи хемије за екологе (2019/2020), Опште хемије (2020/2021) и тренутно је ангажован на предмету Општа хемија (2021/2022). Експерименталну израду докторске дисертације ради у истраживачкој групи професора др Зорана Д. Матовића. У оквиру експерименталне израде докторске дисертације, Марко Д. Радовановић се бави научно-истраживачким радом из области медицинске неорганске хемије са аспекта компјутерске молекулске и квантне механике. Предмет његовог истраживања је моделирање и симулације реактаната и продуката реакције комплекса прелазних метала са биолошким макромолекулима (ДНК, Протеини). Марко Д. Радовановић је до сада објавио четири научна рад у часописима од међународног значаја (три у категорији М22 и један у категорији М23), и једно саопштење на националној конференцији (категирија М64).

7. Преглед научно-истраживачког рада кандидата

Кандидат до сада има 4 рада публикована у истакнутим међународним часописима (3 категорије М22 и 1 категорије М23) и једно саопштење на националној конференцији (категирија М64).

Списак публикација кандидата

1. Научни радови публиковани у часописима међународног значаја:

- 1.1. Marija S. Jeremić, **Marko D. Radovanović**, Franco Bisceglie, Vesna V. Kojić, Ratomir Jelić, Zoran D. Matović, Rhodium(III) in a cage of the 1,3-propanediamine-N,N,N'-triacetate chelate: X-ray structure, solution equilibria, computational study and biological behavior, *Polyhedron* 156 (2018) 19-30. DOI: 10.1016/j.poly.2018.08.075

- 1.2. Marija S. Jeremić, **Marko D. Radovanović**, Frank W. Heinemann, Miorad M. Vasojević, Zoran D. Matović, "Structural and theoretical investigations of the Rh(III) and Co(III) complexes containing symmetrical edta-type ligands with mixed carboxylate and diamine rings: Quantum-mechanical insight into isomer distribution, *Polyhedron* 169 (2019) 89-101. DOI: 10.1016/j.poly.2019.04.053
- 1.3. Marija S. Jeremić, **Marko D. Radovanović**, Olivera R. Klisurić, Svetlana K. Belošević, Zoran D. Matović, Synthesis and characterization of the missing trans(O6) isomer Ni(II) complex containing symmetrical edta-type ligand with mixed carboxylate and diamine rings: Quantum-mechanical evaluation of differ isomers, *Inorganica Chimica Acta* 495 (2019) 118954. DOI: 10.1016/j.ica.2019.118954
- 1.4. **Marko D. Radovanović**, Marija S. Ristić, Matija Zlatar, Frank W. Heinemann, Zoran D. Matović, New rhodium(III)-ED3AP complex: crystal structure, characterization and computational chemistry *Journal of the Serbian Chemical Society* Jan (2022). DOI: 10.2298/JSC211230003R
2. **Научна саопштења на домаћим и међународним конференцијама штампана у изводу (М64 и М34)**
- 2.1. **Марко Радовановић**, Марија Ристић, Маја Ђукић, Игњат Филиповић, Frank W. Heinemann, Зоран Матовић, Синтеза и кристална структура *cis-equatorial*-Na[Rh(Hed3ap)Cl]·2.22H₂O. 27th conference of the Serbian crystallographic society, Kragujevac, Serbia, 2021, p. 50-51.

ЗАКЉУЧАК

Марко Д. Радовановић има звање мастер хемичара које је стекао на Природно-математичком факултету Универзитета у Крагујевцу. Школске 2018/2019. године је уписао докторске академске студије на истом Факултету, на студијској групи Хемија и положио је све испите прописане планом и програмом студија са просечном оценом 10. Кандидат активно ради на изради докторске дисертације. Објавио је један рад у часопису са SCI листе, који се директно односи на истраживања предложена у оквиру теме докторске дисертације (категорије **M23**). На основу свега изложеног Комисија закључује да је предложена тема докторске дисертације

„СИНТЕЗА И КВАНТНО-МЕХАНИЧКИ ЗАВИСНА ЕВАЛУАЦИЈА ЛИГАНДНОГ ПОЉА НЕКИХ КОМПЛЕКСА РОДИЈУМА(III) СА ЛИГАНДИМА ЕДТА-ТИПА“

оригинална и значајна са научне тачке гледишта. Такође, сматрамо да кандидат **Марко Д. Радовановић** испуњава све услове за успешан рад и реализацију наведене теме. За коменторе докторске дисертације се предлажу др Зоран Д. Матовић, редовни професор Природно-математичког факултета Универзитета у Крагујевцу и др Матија Златар, виши научни сарадник на Институту за хемију, технологију и металургију у Београду.

У Крагујевцу и Београду, 10. фебруар 2022. године

КОМИСИЈА



др Зоран Д. Матовић
-предложени коментор-
Природно-математички факултет
Универзитет у Крагујевцу
Ужа научна област: Неорганска хемија



др Матија Златар, виши научни сарадник
- предложени коментор -
Институт за хемију, технологију и металургију у Београду
Научна област: хемија



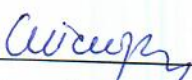
др Биљана Петровић, редовни професор
- председник комисије -
Природно-математички факултет
Универзитет у Крагујевцу
Ужа научна област: Неорганска хемија

**НАСТАВНО-НАУЧНОМ ВЕЋУ ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКОГ ФАКУЛТЕТА
УНИВЕРЗИТЕТА У КРАГУЈЕВЦУ**
И
ВЕЋУ КАТЕДРЕ ИНСТИТУТА ЗА ХЕМИЈУ
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКОГ ФАКУЛТЕТА УНИВЕРЗИТЕТА У КРАГУЈЕВЦУ

Извештај о оцени научне заснованости теме и испуњености услова кандидата за израду докторске дисертације са темом: „**СИНТЕЗА И КВАНТНО-МЕХАНИЧКИ ЗАВИСНА ЕВАЛУАЦИЈА ЛИГАНДНОГ ПОЉА НЕКИХ КОМПЛЕКСА РОДИЈУМА(III) СА ЛИГАНДИМА ЕДТА ТИПА**“ кандидата **Марка Радовановића**, задовољава критеријуме прописане Законом о високом образовању, Правилником о пријави, изради и одбрани докторске дисертације Универзитета у Крагујевцу, Правилником о докторским академским студијама на Природно-математичком факултету Универзитета у Крагујевцу и Правилником о пријави, изради и одбрани докторске дисертације на Природно-математичком факултету Универзитета у Крагујевцу.

У Крагујевцу,
11.02.2022. године

Руководилац докторских студија
на Институту за хемију


Проф. др Биљана Петровић

