

Изешинији саипасач
Ш. Јоковић

УНИВЕРЗИТЕТ У КРАГУЈЕВЦУ
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ

Број одлуке:	09.01.2019
Датум:	09.01.2019
Одбор:	05 50/2 - -

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

На седници Наставно-научног већа Природно-математичког факултета у Крагујевцу, одржаној 28.11.2018. године (број одлуке: 840/XIV-2), предложени смо, а на седници Већа за природно-математичке науке Универзитета у Крагујевцу одржаној 12.12.2018. године (број одлуке: IV-01-1008/15), изабрани смо за чланове Комисије за подношење извештаја за оцену научне заснованости теме и испуњености услова кандидата за израду докторске дисертације под насловом: **"УТИЦАЈ СТРУКТУРНИХ ЕФЕКТА НА ЛОКАЛНУ АРОМАТИЧНОСТ БЕНЗЕНОИДНИХ УГЉОВОДОНИКА И ЊИХОВИХ ДЕРИВАТА"** кандидата Марије Антић (рођене Марковић), мастер хемичара, студента докторских академских студија. На основу података којима располажемо достављамо следећи

ИЗВЕШТАЈ

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

Појам ароматичности је један од најчешће коришћених појмова у модерној хемији. И поред широке употребе, појам ароматичности нема јединствену и општеприхваћену дефиницију. За квалитативан и квантитативан опис ароматичности молекула данас се користе теоријске и експерименталне методе које прате различите манифестације појаве ароматичности, као што су циклична делокализација електрона, повећана термодинамичка стабилност, специфичне магнетне и геометријске особине, као и карактеристична реактивност молекула. Квантитативну меру ароматичности дају индекси ароматичности, који имају за циљ да опишу неку од карактеристичних манифестација ароматичности. Испитивање ароматичних особина молекула даје сазнање о тзв. глобалној ароматичности. С друге стране, могуће је проучавати и ароматичност појединих делова датог

полицикличног система, што доводи до познавања тзв. локалне ароматичности. Свакодневно се синтетишу и карактеришу нови молекули са различитим ароматичним особинама, које могу да варирају од типично ароматичних до неароматичних, антиароматичних, или двоструко ароматичних. Познавање структурних ефеката који утичу на глобалну ароматичност, као и на расподелу локалне ароматичности од великог су значаја како за теоријску, тако и за примењену хемију.

У оквиру предложене докторске дисертације биће испитивано како различити структурни ефекти могу да утичу на глобалну и локалну ароматичност у бензеноидним угљоводонцима и њиховим погодном модификованим дериватима. Познавање наведених ефеката даје могућност рационалног дизајна система са жељеним ароматичним особинама. У недавној прошлости синтетисан је велики број нових бензеноидних угљоводоника и њихових деривата, који су до скоро третирани као искључиво хипотетички системи и који су једино теоријски испитивани. Показује се да међу новосинтетисаним дериватима бензеноидних система, постоје молекули чије се карактеристичне електронске особине могу искористити у развоју нових материјала потребних у савременој електроници и оптици. Резултати ове докторске дисертације даће допринос схватању и рационализацији електронске структуре и ароматичних особина новосинтетисаних деривата бензеноидних угљоводоника.

Веза са досадашњим истраживањима

Предмет научних истраживања кандидата Марије Антић је примена различитих теоријских метода за квантификовање локалне ароматичности у органским и неорганским молекулима, као и теоријско проучавање механизма хемијских реакција. Марија Антић је део истраживачке групе која се годинама бави применом постојећих и развијањем нових метода за квантификацију ароматичности. Ова истраживања су саставни део пројекта бр. 174033 финансираног од владе Републике Србије. Рад у оквиру ове тезе ће омогућити кандидату континуитет у раду и допринети у изучавању електронских, структурних и геометријских ефеката који могу да утичу на расподелу локалне ароматичности у неком полицикличном конјугованом молекулу, што у крајној линији даје могућност рационалног дизајна система са жељеним ароматичним особинама.

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

Предмет, циљеви и хипотезе ове дисертације обухватају следеће:

- ✓ Упоредно истраживање ароматичности посебно одабраних бензеноидних молекула и њихових деривата коришћењем различитих индекса ароматичности (енергетски, делокализациони, геометријски и магнетни). Испитивани молекули ће обухватити и недавно синтетисане деривате бензеноидних угљоводоника.
- ✓ Испитивање примене различитих индекса ароматичности са циљем унапређивања њихових перформанси за опис феномена ароматичности.
- ✓ На основу упоредне анализе биће извршена селекција оних индекса који показују најконзистентније резултате у опису локалне ароматичности испитиваних молекула.
- ✓ Испитивање ефекта присуства различитих хетероатома на локалну ароматичност у испитиваним полицикличним молекулима.
- ✓ Испитивање ефекта одступања од планарности на глобалну и локалну ароматичност бензеноидних молекула.
- ✓ Испитивање ефекта присуства различитих супституената на периметру бензеноидног молекула на локалну ароматичност датог система.

Методe истраживања

У овим испитивањима за квантификацију локалне ароматичности користиће се теоријски добијени индекси ароматичности: електронски индекс ароматичности MCI (multicenter delocalization index), геометријски индекс HOMA (harmonic oscillator model of aromaticity), магнетни индекси NICS (nucleus independent chemical shift) и мапе магнетно-индукованих струја, као и енергетски индекси e_f (energy effect) и ASE (Aromatic stabilization energy). Индекси за квантификацију локалне ароматичности биће рачунати помоћу доступних квантно-хемијских програмских пакета (Gaussian09, GAMESS-US, MultiWFN), као и програма развијених на Природно-математичком факултету у Крагујевцу.

Оквирни садржај докторске дисертације

У општем делу предложене докторске дисертације биће приказан преглед недавних резултата из дате области истраживања, као и детаљан опис метода које су коришћене у истраживању. Добијени резултати ће бити наведени и дискутовани на одговарајући начин. У оквиру дискусије добијених резултата биће анализирано какве су могућности и ограничења коришћених индекса ароматичности. Очекује се да ће предложена испитивања показати како различите промене у структури молекула (присуство хетероатома, различите аелације, различит степен одступања од планарности, присуство различитих супституената) могу да утичу на глобалну и локалну ароматичност.

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

Комисија закључује да је предложена тема докторске дисертације **"УТИЦАЈ СТРУКТУРНИХ ЕФЕКТА НА ЛОКАЛНУ АРОМАТИЧНОСТ БЕНЗЕНОИДНИХ УГЉОВОДОНИКА И ЊИХОВИХ ДЕРИВАТА"** кандидата **Марије Антић** оригинална идеја.

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

Добро је познато да бензеноидни угљоводоници и њихови деривати представљају класу једињења која су предмет бројних теоријских и експерименталних истраживања која трају дуже од једног века. Ова једињења налазе бројне примене у хемијској, фармацеутској индустрији и у техници. Нарочито су актуелна истраживања на примени ових једињења у електроници и оптици. Испитивања у оквиру предложене докторске дисертације дају допринос познавању електронске структуре и електронских особина бензеноидних угљоводоника и њихових деривата. Предложено је да се ефекат присуства хетероатома на локалну ароматичност испита поређењем ароматичности хетероцикличних молекула и аналогних конјугованих угљоводоника. Добро је познато да се ароматичност често везује

за планарне молекуле. У предложеном истраживању биће проучаване серије непланарних полицикличних конјугованих молекула, како би се квантификовао степен утицаја непланарности на ароматичност испитиваних молекула. Да би се дао одговор на питање како присуство различитих супституената на периметру бензеноидних молекула утиче на локалну ароматичност датог молекула, биће упоређена локална ароматичност супституисаних и одговарајућих несупституисаних бензеноидних молекула. Крајњи циљ ове докторске дисертације је упознавање електронских, структурних и геометријских ефеката који могу да утичу на расподелу локалне ароматичности у неком полицикличном конјугованом молекулу, што у крајној линији даје могућност рационалног дизајна система са жељеним ароматичним особинама.

5. Предложени ментор израде докторске дисертације

Институт за хемију Природно-математичког факултета Универзитета у Крагујевцу је за ментора ове докторске дисертације предложио др Славка Раденковића, ванредног професора Природно-математичког факултета у Крагујевцу. Образложење: др Славко Раденковић се бави истраживањима из уже научне области Физичка хемија и до сада има преко 60 радова публикованих у реномираним научним часописима са SCI листе, као и саопштења на међународним и националним конференцијама. Др Славко Раденковић се бави применом и развојем метода квантне хемије за опис електронске структуре молекула. У оквиру својих истраживања бави се применом и унапређивањем постојећих индекса ароматичности. На основу горе наведеног, а имајући у виду циљеве и очекиване резултате ове дисертације, сматрамо да др Славко Раденковић испуњава све услове за ментора ове докторске дисертације.

Научна област дисертације

Предложена докторска дисертација припада ужој научној области Органска хемија.

Научна област чланова комисије

Чланови комисије се баве истраживањем у области Физичке и Органске хемије. Др Славко Раденковић је ванредни професор на Природно-математичком факултету, Универзитета у

Крагујевцу. Друга два члана комисије, др Борис Фуртула, ванредни професор Природно-математичког факултета у Крагујевцу, и др Марија Баранац-Стојановић, редовни професор Хемијског факултета у Београду, објавили су већи број научних радова у најпознатијим часописима са SCI листе.

6. Кратка биографија кандидата

Марија Антић (девојачко Марковић) је рођена 01.09.1988. године у Чачку. Основну школу завршила је 2003. године и носилац је Вукове дипломе. Средњу медицинску школу у Чачку, смер фармацеутски техничар, завршила је 2007. године са одличним успехом. Исте године уписала је Природно-математички факултет у Крагујевцу, одсек хемија, смер наставник хемије. Основне академске студије завршила је 29.09.2011. године са просечном оценом 8.40, и тиме стекла звање дипломирани хемичар-наставник хемије. Исте године уписује мастер академске студије на Природно-математичком факултету у Крагујевцу под менторством Проф. др Ивана Гутмана. Мастер студије завршила је 24.09.2012. године са просечном оценом 9.78. Докторске академске студије хемије-смер органска хемија уписала је 2012. године на Природно-математичком факултету у Крагујевцу. Од 15.03.2015. године укључена је у рад пројекта Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије „Теорија графова и математичко програмирање са применама у хемији и рачунарству“, број 174033, као истраживач сарадник. Марија Антић се бави истраживањима из области теоријске и квантне хемије. У својим истраживањима бави се применом постојећих и развојем нових метода и софтвера за опис електронске структуре молекула, опис реактивности и других физичко-хемијских особина једињења. Највећи део научно-истраживачког рада Марије Антић чине испитивања квалитативног и квантитативног описа ароматичности органских и неорганских молекулских система. До сада има тринаест објављених научних радова у часописима од међународног значаја и два саопштења на конференцијама.

7. Преглед научно-истраживачког рада кандидата

На основу података датих у оквиру тачке 6, као и на основу личног познавања кандидата сматрамо да је кандидат Марија Антић у досадашњем раду показала интересовање, способност и самосталност у научно-истраживачком раду. Кандидат говори и пише на енглеском језику, што је неопходно за научни рад.

Објављени радови кандидата:

Научни радови публиковани у врхунским часописима међународног значаја (M21):

1. S. Radenković, J. Kojić, J. Petronijević, **M. Antić**, Effect of benzo-annulation on local aromaticity in heterocyclic conjugated compounds, *Journal of Physical Chemistry A*, **118** (2014) 11591–11601.

DOI: 10.1021/jp507309m

ISSN: 1089-5639

(IF=2,693 за 2014. годину; 10/34, област: Physics, Atomic, Molecular & Chemical, Категорија: **M21**)

2. A. Pavic, B. Glišić, S. Vojnovic, B. Warzajtis, N. Savić, **M. Antić**, S. Radenković, G. Janjić, J. Nikodinovic-Runic, U. Rychlewska, M. Djuran, Mononuclear gold(III) complexes with phenanthroline ligands as efficient inhibitors of angiogenesis: A comparative study with auranofin and sunitinib, *Journal of Inorganic Biochemistry*, **174** (2017) 156–168.

DOI: 10.1016/j.jinorgbio.2017.06.009

ISSN: 0162-0134

(IF=3.063 за 2017. годину; 10/45, област: Chemistry, Inorganic & Nuclear, Категорија: **M21**)

Научни радови публиковани у врхунским часописима међународног значаја (M22):

1. S. Radenković, **M. Antić**, J. Đurđević, S. Jeremić, Electronic structure study of the biradical pleiadene-like molecules, *Monatshefte für Chemie*, **145** (2014) 281-290.

DOI: 10.1007/s00706-013-1114-4

ISSN: 0026-9247

(IF=1,222 за 2014. годину; 91/157, област: Chemistry, Multidisciplinary, Категорија: **M22**)

2. S. Radenković, I. Gutman, **M. Antić**, A case of breakdown of the Pauling bond order concept, *Chemical Physics Letters*, **614** (2014) 104–109.

DOI: 10.1016/j.cplett.2014.09.008

ISSN: 0009-2614

(IF=1,897 за 2014. годину; 17/34, област: Physics, Atomic, Molecular & Chemical, Категорија: **M22**)

3. B. Đ. Glišić, N. D. Savić, B. Warzajtis, L. Djokic, T. Ilic-Tomic, **M. Antić**, S. Radenković, J. Nikodinovic-Runic, U. Rychlewska, M. I. Đuran, Synthesis, structural characterization and biological evaluation of dinuclear gold(III) complexes with aromatic nitrogen-containing ligands: antimicrobial activity in relation to the complex nuclearity, *Medicinal Chemical Communications*, **7** (2016) 1356–1366.
DOI: 10.1039/C6MD00214E
ISSN: 2040-2503
(IF=2.608 за 2016. godinu; 29/60, област: Chemistry, Medicinal, Категорија: **M22**)
4. S. Jeremić, S. Radenković, M. Filipović, **M. Antić**, A. Amić, Z. Marković, Importance of hydrogen bonding and aromaticity indices in QSAR modeling of the antioxidative capacity of selected (poly)phenolic antioxidants, *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, **72** (2017) 240–245.
DOI: 10.1016/j.jm gm.2017.01.011
ISSN: 1093-3263
(IF=1.885 за 2017. godinu; 56/105, област: Computer Science, Interdisciplinary Applications, Категорија: **M22**)
5. S. Radenković, **M. Antić**, N. Savić, B. Glišić, The nature of Au—N bond in gold(III) complexes with aromatic nitrogen-containing heterocycles. The influence of Au(III) ion on the ligand aromaticity, *New Journal of Chemistry*, **41** (2017) 12407-12415.
DOI: 10.1039/C7NJ02634J
ISSN: 12407-0546
(IF=3.2013а 2017. godinu; 65/171, област: Chemistry, Multidisciplinary, Категорија: **M22**)
6. **M. Antić**, B. Furtula, S. Radenković, Aromaticity of nonplanar fully benzenoid hydrocarbons, *Journal of Physical Chemistry A*, **121** (2017) 3616-3626.
DOI: 10.1021/acs.jpca.7b02521
ISSN: 1089-5639
(IF=2.836 за 2017. godinu; 14/37, област: Physics, Atomic, Molecular & Chemical, Категорија: **M22**)

Научни радови публиковани у врхунским часописима међународног значаја (M23):

1. I. Gutman, J. Đurđević, Z. Matović, **M. Marković**, Verifying the modes of cyclic conjugation in tetrabenzob[bc,ef,op,rs]circumanthracene, *Journal of Serbian Chemical Society*, 77 (2012) 1401-1408.
DOI: 10.2298/JSC120518064G
ISSN: 0352-5139
(IF=0,912 за 2012. годину; 100/152, област: Chemistry, Multidisciplinary, Категорија: **M23**)
2. **M. Marković**, J. Đurđević, I. Gutman, Cyclic conjugation in benzo- and benzocyclobutadieno-annelated terrylene and higher rylene, *Journal of Serbian Chemical Society*, 77 (2012) 751-759.
DOI: 10.2298/JSC120131012M
ISSN: 0352-5139
(IF=0,912 за 2012. годину; 100/152, област: Chemistry, Multidisciplinary, Категорија: **M23**)
3. I. Gutman, S. Radenković, **M. Antić**, J. Đurđević, A test of Clar aromatic sextet theory, *Journal of Serbian Chemical Society*, 78 (2013) 1539–1546
DOI: 10.2298/JSC130520057G
ISSN: 0352-5139
(IF=0,889 за 2013. годину; 105/148, област: Chemistry, Multidisciplinary, Категорија: **M23**)
4. S. Radenković, I. Gutman, S. Zdravković, **M. Antić**, Strain in strain-free benzenoid hydrocarbons: The case of fibonacenes, *Chemical Papers*, 71 (2017) 1491–1495.
DOI: 10.1007/s11696-017-0143-6
ISSN: 0366-6352
(IF=0.963 за 2017. годину; 131/171, област: Chemistry, Multidisciplinary, Категорија: **M23**)

5. S. Radenković, **M. Antić**, S. Đorđević, B. Brajda, π -electron content of rings in polycyclic conjugated compounds – A valence bond based measure of local aromaticity, *Computational and Theoretical Chemistry*, 1116 (2017) 163–173.

DOI: 10.1016/j.comptc.2017.01.028

ISSN: 2210-271X

(IF=1.443 за 2017. godinu; 111/147, област: Chemistry, Physical, Категорија: **M23**)

Научна саопштења на међународним конференцијама штампана у изводу (M34):

1. **M. Antić**, S. Radenković, The “Anthracene problem”: Reactivity-based aromaticity study of benzo-annelated anthracenes, *MATH/CHEM/COMP-The 28th International Course & Conference on the Interfaces among Mathematics, Chemistry and Computer Sciences, 2016, Dubrovnik, Croatia, Abstract pp. 29.*

Научна саопштења на националним конференцијама штампана у изводу (M64):

1. S. Radenković, **M. Antić**, N. Savić, B. Glišić, M. Djuran, The nature of Au-N bond and aromaticity of N-heterocycles coordinated to Au(III) ion, *53rd Meeting of the Serbian Chemical Society, 2016, Kragujevac, Serbia, Abstract pp. 67*

ЗАКЉУЧАК

На основу свега изложеног комисија закључије да је предложена тема докторске дисертације "УТИЦАЈ СТРУКТУРНИХ ЕФЕКТА НА ЛОКАЛНУ АРОМАТИЧНОСТ БЕНЗЕНОИДНИХ УГЉОВОДОНИКА И ЊИХОВИХ ДЕРИВАТА" оригинална и значајна са научне тачке гледишта. Такође сматрамо да кандидат **Марија Антић** испуњава све услове за успешан рад и реализацију наведене теме.

У Крагујевцу и Београду,
28.12.2018. год.

Комисија

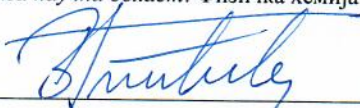


1. др Славко Раденковић, ванредни професор,

ментор рада

Природно-математички факултет,
Универзитет у Крагујевцу

Ужа научна област: Физичка хемија



2. др Борис Фуртула, ванредни професор,

председник комисије

Природно-математички факултет,
Универзитет у Крагујевцу

Ужа научна област: Физичка хемија



3. др Марија Баранац-Стојановић, редовни професор,

члан комисије

Хемијски факултет,
Универзитет у Београду

Ужа научна област: Органска хемија