

шешуја сим
Држи

ПРИЛОЖЕНО 21.12.2020
Сер. бр. 03 620/22

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 25.11.2020. године (број одлуке: 540/XIII-1), предложени смо, а на седници Већа за природно-математичке науке одржаној 09.12.2020. године (брз одлуке: IV-01-920/12), изабрани смо за чланове Комисије за подношење извештаја за оцену научне заснованости теме и испуњености услова кандидата за израду докторске дисертације под насловом: „**Теоријеско испитивање електронске структуре и магнетних особина кластера бора**“ кандидата **Слађане Ђорђевић**, мастер хемичара, студента докторских академских студија. На основу података којима располажемо достављамо следећи

И З В Е Ш Т А Ј

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

Кластери по својим хемијским и физичким особинама представљају прелаз између молекула и чврстог стања. Нагли развој хемије кластера започиње током шездесетих година прошлог века, упоредо са развојем рендгентске структурне анализе и других спектроскопских техника. Систематска експериментална и теоријска истраживања кластера бора трају готово тридесет година. Кластери бора показују низ јединствених електронских и структурних особина, које се приписују електронској дефицитарности атома бора. Чисти кластери бора могу постојати у више различитих структурних облика, као што су планарни, квазипланарни, тубуларни, облици фулеренског типа, итд. Овако широк дијапазон различитих геометријских и електронских структура узрокују да кластери бора показују читав спектар различитих физичко-хемијских особина. Проучавање структуре и хемијског везивања у кластерима бора представља изазов не само за теоријску хемију, већ отвара пут за примене ових хемијских система. Кластери бора показују значајан потенцијал у развоју нових материјала са жељеним магнетним и проводним особинама, које могу варирати од полуправодникова до суперправодникова. Развој молекулских машина представља велики искорак у развоју хемије, о чему сведочи и Нобелова награда за хемију додељена 2016. године за ово откриће. Различити кластери бора се управо проучавају као кандидати за реализацију идеје

молекулских машина. Познавање везе између геометрије и електронске структуре кластера бора и њихових физичко-хемијских особина је и даље отворен проблем.

За разлику од чистих кластера угљеника који често постоје у облику моноцикличних структура, бор гради планарне или квазипланарне структуре које најчешће нису моноцикличне. Нађено је да се моноцикличне структуре бора могу стабилизовати увођењем атома других метала у структуру кластера. У оквиру предложене дисертације биће испитано како се моноцикличне структуре бора могу стабилизовати помоћу елемената друге групе Периодног система елемената (Be, Mg, Ca). Електронска структура испитиваних система ће бити детаљно испитана применом софистицираних квантнохемијских метода, као што су метода функционала густине (енг. Density Functional Theory - DFT) и метода спрегнутих кластера (енг. Coupled Cluster - CC). Кластери бора показују висок степен делокализације електрона. Поменуте методе представљају тренутно најпоузданији приступ за опис електронске структуре овако комплексних хемијских система. Магнетне особине датих кластера биће испитиване рачунањем густина струја индукованих у присуству спољашњег магнетног поља. Крајњи циљ ове докторске дисертације је упознавање електронских и структурних ефеката који могу да утичу на расподелу магнетно индукованих густина струје, што у крајњој линији даје могућност рационалног дизајна кластера са жељеним електронским и магнетним особинама.

Веза са досадашњим истраживањима

Слађана Ђорђевић је део истраживачке групе за квантну и рачунарску хемију која се дужи низ година бави испитивањем електронске структуре и магнетних особина различитих молекула и кластера. Истраживања у оквиру ове докторске дисертације су саставни део пројекта који финансира Министарство просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије. Рад у оквиру ове дисертације ће омогућити кандидату континуитет у истраживању и допринети познавању електронске структуре различитих кластера бора.

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

Предмет, циљеви и хипотезе ове дисертације обухватају следеће:

- Чисти кластери бора могу постојати у више различитих структурних облика: планарни, квазипланарни, тубуларни, облици фулеренског типа, итд. У оквиру предложене дисертације биће испитано како се моноцикличне структуре бора могу стабилизовати помоћу елемената друге групе

Периодног система елемената (Be, Mg, Ca). За одређивање најстабилније структуре, тзв. структуре глобалног минимума, упоредно ће бити коришћено неколико различитих алгоритама за претрагу структуре глобалног минимума.

- Одређивање структуре глобалног минимума биће изведено за могућа синглетна и триплетна спинска стања, јер се показало да неки кластери бора могу бити стабилни у триплетном спинском стању.
- Кластере бора карактерише висок степен делокализације електрона. Поред делокализације π -електрона у кластерима бора може истовремено да се јави и значајна делокализација σ -електрона. Као последица истовремене цикличне делокализације π - и σ -електрона, кластери бора показују тзв. двоструку ароматичност.
- Магнетне особине кластера бора биће одређене на основу израчунатих густина магнетно индукованих струја. Израчунате густине струја се директно могу повезати са експериментално мерљивим магнетним параметрима, као што су хемијска померања у спектру нуклеарне магнетне резонанције.
- Испитивање се веза између природе густина магнетно индукованих струја и електронске структуре испитиваних кластера.
- Густине магнетно индукованих струја дају индиректну меру степена делокализације електрона, а самим тим и особина ароматичности у датом молекулу. Ароматичност у посматраним кластерима бора биће испитивана на основу израчунатих густина струја, али и других индекса ароматичности који одређују електронске, геометријске и магнетне аспекте ароматичности.

Методе истраживања

- Одређивање структура глобалних минимума испитиваних система вршиће се упоредним коришћењем неколико различитих алгоритама за претрагу структуре глобалног минимума. Алгоритми који ће бити коришћени су примењени у одговарајућем софтверу: Calypso (Crystal structure AnaLysis by Particle Swarm Optimization), CK (Coalescence Kick) и AUTOMATON.
- Енергије испитиваних структура биће одређене применом метода функционала густине (DFT), а за даљу потврду енергетских разлика користиће се метода спрегнутих кластера (CC). Ови рачуни биће обављени коришћењем програма Gaussian09.
- Електронска структура кластера бора биће испитивана на основу просторне расподеле молекулских орбитала, као и применом интерпретативних метода као што су NBO (Natural Bond Orbital) и AdNDP (Adaptive Natural Density

Partitioning) анализа. Овај тип прорачуна врши се помоћу програма Gaussian09 и Multiwfn.

- Магнетне особине кластера бора биће одређене на основу густине магнетно индукованих струја, које ће бити израчунате применом CTOCD-DZ (Diamagnetic-Zero variant of the Continuous Transformation of the Origin of the Current Density) методе која је имплементирана у софтвер који је развијен у оквиру истраживачке групе у којој Кандидат обавља свој истраживачки рад.

Оквирни садржај докторске дисертације

У Општем делу ове докторске дисертације биће дат преглед досадашњих експерименталних и теоријских истраживања кластера бора. У овом делу рада биће описане теоријске основе свих метода које ће бити коришћене у раду: методе претраге глобалног минимума, методе за рачунање магнетно индукованих густина струје, методе за анализу и локализацију добијених таласних функција и методе којима можемо одредити различите индексе ароматичности. У оквиру Рачунских метода биће описани сви теоријски модели који су коришћени у истраживању. У делу Резултати и дискусија биће детаљно представљени и дискутовани остварени резултати у оквиру ове докторске дисертације. Завршни део ове докторске дисертације чине поглавље Закључци у коме ће концизно бити набројани најважнији резултати проистекли из рада на овој докторској дисертацији. На крају ће бити дат целокупан преглед коришћених референци у оквиру поглавља Литература.

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 Слађане Ђорђевић, Комисија закључује да је предложена тема докторске дисертације „Теоријско испитивање електронске структуре и магнетних особина кластера бора“ 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

Експериментална и теоријска истраживања су показала да кластери бора могу постојати у више различитих структурних облика, тако да ови кластери показују

веома разноврсне физичко-хемијских особина. Ово је један од разлога зашто кластери бора показују велики потенцијал у развоју нових врста материјала. Испитивање релација између структуре кластера бора и њихових физичко-хемијских особина је и даље актуелан проблем који привлачи пажњу хемичара. Посебан изазов у хемији кластера бора је карактеризација кластера моноцикличне структуре. У оквиру предложене дисертације биће испитано како се моноцикличне структуре бора могу стабилизовати помоћу елемената друге групе Периодног система елемената (Be, Mg, Ca). Различити алгоритми за претрагу структуре глобалног минимума биће употребљени за одређивање најстабилнијих структура. Електронска структура испитиваних система ће бити детаљно анализирана применом *ab initio* квантнохемијских метода. Посебна пажња ће бити посвећена проучавању ефеката цикличне делокализације електрона у кластерима бора. Магнетне особине проучаваних кластера ће бити испитиване рачунањем магнетно индукованих густине струја. Добијени резултати даће могућност да се одреди утицај различитих електронских и структурних параметара на природу магнетно индукованих густине струје које су мера магнетних особина испитиваних кластера бора.

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.

Образложение: др Славко Раденковић се активно бави научно-истраживачким радом у области теоријске физичке хемије. До сада је објавио преко 80 научних радова у признатим међународним часописима, коаутор је једне публикације из категорије M13, две публикације из категорије M14. Кандидат има већи број саопштења на међународним и националним научним конференцијама. На основу горе наведеног, а имајући у виду циљеве и очекivanе 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 Теоријска хемија.

Научна област чланова комисије

Чланови комисије се баве истраживањем у области теоријске Физичке и Органске хемије. Др Славко Раденковић је ванредни професор Природно-математичког факултета у Крагујевцу. Др Иван Гутман је професор емеритус на Природно-математичком факултету Универзитета у Крагујевцу и редовни члан САНУ. Др Марија Баранац-Стојановић је редовни професор Хемијског факултета у Београду.

6. Кратка биографија кандидата

Слађана Ђорђевић је рођена 4. јуна 1993. године у Приштини. Основну школу је завршила у Крушевцу. Након тога је завршила Гимназију, друштвено-језички смер са одличним успехом. Школске 2012/13. године уписала је основне академске студије, студијски програм Хемија, модул Хемичар за истраживање и развој на Природно-математичком факултету Универзитета у Крагујевцу. Током школске 2013/14. године изабрана је за најбољег студента хемије. Основне академске студије је завршила 27.9.2016. године са просечном оценом 9.71. Мастер академске студије, на Природно-математичком факултету Универзитета у Крагујевцу уписала је школске 2016/17. године под менторством проф. др Славка Раденковића. Мастер академске студије је завршила 6.7.2017. године, са просечном оценом 10. Докторске академске студије на Природно-математичком факултету у Крагујевцу уписала је школске 2017/2018. године

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 Слађана Ђорђевић у досадашњем раду показала интересовање, способност и самосталност за научно-истраживачки рад. Кандидат говори и пише на енглеском језику, што је неопходно за научни рад. Слађана Ђорђевић је до сада објавила осам научних радова у часописима од међународног значаја (један из категорије M21, четири из категорије M22 и три из категорије M23), два рада у часопису од националног значаја (категорија M53), два саопштења на научним скуповима (категорија M63 и M64). Кандидат је први аутор на два рада која су објављена у часописима са SCI листе.

Списак публикација кандидата:

Научни радови публиковани у врхунским међународним часописима (M21)

1. **Slđana Đorđević**, Slavko Radenković

Magnetically induced current density in triple-layered beryllium–boron clusters
Physical Chemistry Chemical Physics **21** (2019) 7105-7114.

DOI: 10.1039/C9CP00541B

ISSN: 1463-9076

IF = 3,430 за 2019. годину; 8/37: област: Physics, Atomic, Molecular & Chemical; категорија: M21

Научни радови публиковани у истакнутим међународним часописима (M22)

2. **Slđana Đorđević**, Slavko Radenković

Singlet and triplet states of the sandwich-type Be₂B₆ and Be₂B₇⁺ clusters. A test for electron counting rules of aromaticity

New Journal of Chemistry **44** (2020) 19780-19788.

DOI: 10.1039/D0NJ04643D

ISSN: 1144-0546

IF = 3.288 за 2019. годину; 68/177: област: Chemistry, Multidisciplinary; категорија: M22

3. Marija Antić, **Slđana Đorđević**, Boris Furtula, Slavko Radenković

Magnetically induced current density in nonplanar fully benzenoid hydrocarbons
Journal of Physical Chemistry A **124**, 2 (2020) 371-378.

DOI: 10.1021/acs.jpca.9b10352

ISSN: 1089-5639

IF = 2,600 за 2019. годину; 89/159: област: Chemistry, Physical; категорија: M22

4. Ivan Gutman, Slavko Radenković, **Slđana Đorđević**, Igor Milovanović, Emina Milovanović

Total π-electron and HOMO energy

Chemical Physics Letters **649** (2016) 148-150.

DOI: 10.1016/j.cplett.2016.02.051

ISSN: 0009-2614

IF = 1,815 за 2016. годину; 18/36: област: Physics, Atomic, Molecular & Chemical; категорија: M22

5. Slavko Radenković, Ivan Gutman, **Sladana Đorđević**
Strain in strain-free benzenoid hydrocarbons: The case of phenanthrene
Chemical Physics Letters **625** (2015) 69-72.
DOI: 10.1016/j.cplett.2015.02.039
ISSN: 0009-2614
IF = 1,860 за 2015. годину; 19/35: област: Physics, Atomic, Molecular & Chemical; категорија: **M22**

Научни радови публиковани у међународним часописима (M23)

6. Jelena Đurđević Nikolić, **Sladana Đorđević**, Slavko Radenković
Heteroatom effects on aromaticity of five-membered rings in acenaphthylene analogs
Journal of Molecular Modeling **26** (2020)
DOI: 10.1007/s00894-020-04543-w
ISSN: 1610-2940
IF = 1,346 за 2019. годину; 130/177: област: Chemistry, Multidisciplinary; категорија: **M23**
7. Ivan Gutman, Slavko Radenković, **Sladana Đorđević**, Igor Milovanović, Emina Milovanović,
Extending the McClelland formula for total π -electron energy
Journal of Mathematical Chemistry **55** (2017) 1934-1940.
DOI: 10.1007/s10910-017-0772-6
ISSN: 0259-9791
IF = 1,882 за 2017. годину; 93/171: област: Chemistry, Multidisciplinary; категорија: **M23**
8. Slavko Radenković, Marija Antić, **Sladana Đorđević**, Benoît Braïda, 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. годину; 111/147: област: Chemistry, Physical; категорија: **M23**

Научни радови публиковани у часописима националног значаја (M53)

1. Слађана Ђорђевић, Славко Раденковић
Везивање помаком наелектрисања – нови тип хемијске везе
Хемијски преглед год. **59** бр. 3 (2018) 8-12.
ISSN:0440-6826
2. Светлана Марковић, Слађана Ђорђевић, Изудин Реџеповић, Жико
Милановић
Симулирање хемијских спектара помоћу софтвера за молекулско моделирање,
Хемијски преглед год. **60** бр. 4 (2019) 90-95
ISSN:0440-6826

*Научна саопштења на националним конференцијама штампана у целости
(M63)*

1. Igor Đurović, **Sladana Đorđević**, Slavko Radenković
Aromaticity of Roesky's ketone
XXIII Savetovanje o biotehnologiji sa međunarodnim učešćem, Čačak, 9 – 10. mart
2018. godine, 421-426.
ISBN: 978-86-87611-55-9

Научна саопштења на националним конференцијама штампана у изводу (M64)

1. **Sladana Đorđević**, Slavko Radenković
Valence bond study of intramolecular hydrogen bonding in malonildialdehyde
Šesta konferencija mladih hemičara Srbije, Beograd, 27. oktobar 2018. godine, 107.
TH03 PE 2.
ISBN: 978-86-7132-072-6

ЗАКЉУЧАК

Слађана Ђорђевић има звање мастер хемичара које је стекла на Природно-математичком факултету Универзитета у Крагујевцу. Школске 2017/18. године је уписала докторске студије на истом факултету, на студијској групи хемија и све испите предвиђене планом и програмом студија је положила са просечном оценом 10. Кандидат активно ради на изради докторске дисертације. До сада је објавила осам научних радова у часописима од међународног значаја и два рада у часописима од националног значаја. Кандидат је први аутор на два рада (један из категорије M21 и један из категорије M22) која се директно односе на тему докторске дисертације. На основу свега изложеног комисија закључује да је предложена тема докторске дисертације „**Теоријско испитивање електронске структуре и магнетних особина кластера бора**“ оригинална и значајна са научне тачке гледишта. Такође, сматрамо да кандидат Слађана Ђорђевић испуњава све услове за успешан рад и реализацију наведене теме. За ментора ове докторске дисертације предлаже се др Славко Раденковић, ванредни професор Природно-математичког факултета Универзитета у Крагујевцу.

У Крагујевцу и Београду,
14.12.2020. године

К о м и с и ј

С. Раденковић

др Славко Раденковић, ванредни професор

ментор рада

Природно-математички факултет

Универзитет у Крагујевцу

Ужа научна област: Физичка хемија

Ivan Gutman

др Иван Гутман, професор емеритус и редовни члан САНУ

председник комисије

Природно-математички факултет,

Универзитет у Крагујевцу

Ужа научна област: Физичка хемија

М.Баранац-Стојановић

др Марија Баранац-Стојановић, редовни професор

члан комисије

Хемијски факултет

Универзитет у Београду

Ужа научна област: Органска хемија