

**НАСТАВНО-НАУЧНОМ ВЕЋУ
ХЕМИЈСКОГ ФАКУЛТЕТА
УНИВЕРЗИТЕТА У БЕОГРАДУ**

ПРЕДМЕТ: Извештај Комисије за преглед, оцену и одбрану докторске дисертације
Филипа Ж. Влаховића, мастер хемичара

На редовној седници Наставно-научног већа Хемијског факултета Универзитета у Београду, одржаној 12.12.2019. године, изабрани смо за чланове Комисије за преглед, оцену и одбрану докторске дисертације **Филипа Ж. Влаховића**, мастер хемичара, под називом:

"Теорија функционала густине у проучавању електронских стања аква- и оксо- комплекса прве серије прелазних метала".

"Density functional theory for studying electronic states of aqua- and oxo- first row transition metal complexes".

Након прегледа докторске дисертације кандидата, подносимо Наставно-научном већу Хемијског факултета Универзитета у Београду, следећи:

ИЗВЕШТАЈ

А. Приказ садржаја дисертације:

Докторска дисертација кандидата **Филипа Ж. Влаховића**, написана је на 188 страна А4 формата (фонт 12, проред 1.0) са 29 слика и 105 табела (од чега је 41 табела у главном тексту а 64 табеле у *Додатном материјалу*). Дисертација је написана на енглеском језику и организована је у 7 поглавља (171 страна). Након *Увода* (2 стране) следи општи део који се састоји од 6 потпоглавља (27 страна), а затим одељак *Теорија и методе* састављен од 7 потпоглавља (30 страна). Резултати и дискусија су обједињени у 3 потпоглавља (63 стране), након чега следи *Општи закључак* (1 страна), *Додатни материјал* (30 страна), као и *Списак референци* (18 страна, 394 цитата). Дисертација такође садржи и захвалницу (2 стране), резиме на енглеском и српском језику (2 стране), списак кључних речи, списак скраћеница (1 страна), садржај (3 стране), и биографију кандидата на енглеском и српском језику. Поред наведеног, дисертација садржи и изјаву о ауторству, изјаву о истовестности штампане и електронске верзије докторског рада и изјаву о коришћењу.

У *Уводном делу* је описан предмет истраживања ове докторске дисертације, као и њени циљеви. Кандидат описује значај прве серије прелазних метала и њихових комплексних једињења, а посебану пажњу скреће на компликовану електронску структуру и њену повезаност са општим особинама ових једињења, као што су каталитичка моћ,

фотохемијске, електрохемијске и биохемијске особине. Наиме, већина јона прве серије прелазних метала, са делимично попуњеним d - орбиталама, може да има различит спински мултиплицитет у основном стању, односно различита спинска стања. Прецизан опис електронске структуре, и недвосмислено одређивање основног спинског стања представљају један од највећих изазова како са експерименталне, тако и теоријске тачке гледишта. У овом поглављу такође је истакнут и значај теоријске хемије, као и рачунарских метода које су коришћене у овој дисертацији а засноване на теорији функционала густине (*Density Functional Theory DFT*), за одређивање основног и енергетски блиских побуђених спинских стања. Иако прецизно одређивање основног спинског стања није разматрано при развоју већине апроксимација функционала густине (*Density Functional Approximations DFA*), данас постоје *DFA* који су специјално дизајнирани за решавање овог типа проблема, што је и истакнуто у уводном делу дисертације.

Општи део дисертације обухвата шест потпоглавља. Прве два поглавља (поглавља 2.1 и 2.2) садрже фундаменталне концепте на којима је заснована ова дисертација. Кандидат је детаљно приказао важност посматрања електронске структуре молекула као и начин на који се она описује квантно-механички. Објашњен је смисао Шредингерове једначине, као и апроксимације неопходне за примену ове једначине на компликоване вишеелектронске системе. Молекулске врсте као што су комплекси прелазних метала, са делимично попуњеним d - орбиталама, могу имати различит спински мултиплицитет у основном електронском стању, па је самим тим недвосмислено дефинисање основног електронског стања од велике важности јер молекули у различитим електронским (и спинским) стањима имају веома другачије особине. За потпуно разумевање такође је неопходно електронску структуру основног електронског стања довести у везу са електронском структуром побуђених електронских стања, што је и учињено. Треће поглавље (поглавље 2.3) садржи основне информације о првој серији прелазних метала, њиховој електронској структури и особинама. У четвртном поглављу (поглавље 2.4) описане су теорија кристалног и теорија лигандног поља и њихова примена на аква- и оксо- комплексима прве серије прелазних метала. Пето поглавље (поглавље 2.5) се бави спинским стањима, а посебан фокус усмерен је на значај основног и побуђених спинских стања и њихов утицај на различите физичке и хемијске особине једињења. Шеста област (поглавље 2.6) садржи информације о електронским (апсорпционим) спектрима, и описује њихов значај у описивању електронске структуре. Наиме, електронски спектри су резултат електронских прелаза, па самим тим садрже информације и о основном и побуђеним електронским стањима. Једињења са компликованом електронском структуром су често окарактерисана апсорпционим спектрима који су тешки за разумевање, па самим тим кандидат наводи значај теоријских метода за решавање овог изазовног задатка.

У делу **Теорија и методе** су изложени теоријски аспекти метода заснованих на таласној функцији, а затим и комплементарног приступа, теорије функционала густине. *DFT* је постала једна од најчешће коришћених метода за описивање електронских стања атома и молекула употребом тродимензионалне електронске густине, што представља значајно поједностављење у односу на методе засноване на таласној функцији, а при чему се смањује неопходно рачунарско време. Као и свака друга метода, теорија функционала густине има неке добро познате несавршености, па су у овом делу продискутовани бенефити и недостаци ове моћне теоријске алатке. *DFT* је у принципу егзактна теорија,

мада је за њену примену неопходно увести одређене апроксимације и поједностављења. Након кратког прегледа најбитнијих апроксимација, *DFA*, следи дискусија о примењивости различитих могућности и техника теорије функционала густине за описивање и испитивање особина хемијских једињења. Затим се кандидат фокусира на примену ове теоријске методе (у њеним различитим формама) за израчунавање енергије основног и побуђених електронских стања, електронских прелаза а самим тим и репродукцију и предикцију апсорпционих спектра. У овом делу су описане две различите методе, временски зависна теорија функционала густине (*TD-DFT*) и теорија функционала густине заснована на теорији лигандног поља (*LF-DFT*), које су и коришћене у овој тези за израчунавање побуђених стања. Иако важи за знатно популарнију методу, због могућности примене у свим областима хемије, *TD-DFT* има бројне недостатке. Са друге стране, *LF-DFT* је базирана на мулти-детерминантном опису електронских стања и специјално је дизајнирана за третман *d-d* прелаза у комплексима прелазних метала. На самом крају описана је и техника анализе енергетске декомпозиције (*EDA*), као и рачунарски кораци неопходни за њену ефикасну примену у сврху детаљнијег разумевања хемијских особина и хемијске везе у комплексима прелазних метала.

Резултати и дискусија обухватају три потпоглавља, од којих свако садржи и појединачни закључак. У првом поглављу (поглавље 4.1) је изложена систематична валидациона студија две различите методе, *TD-DFT* и *LF-DFT*, за израчунавање основног и побуђених стања прве серије прелазних метала. У ову сврху, разматрана је серија хексааква комплекса опште формуле $[M(H_2O)_6]^{2+/3+}$. Ова серија садржи прелазне метале у различитом јонском облику ($M^{2+/3+} = V^{2+/3+}, Cr^{2+/3+}, Mn^{2+/3+}, Fe^{2+/3+}, Co^{2+/3+}, Ni^{2+}$), па самим тим и различита могућа спинска стања. Иако концептуално веома различите, обе методе су засноване на *DFT*, што отвара могућност за испитивање утицаја различитих *DFA* на добијене резултате. Геометрија испитиваних комплексних јона оптимизована је употребом 5 различитих *DFA*, а валидација две напред наведене методе, изведена је употребом 10 различитих *DFA*. Кандидат скреће пажњу на најзначајнији аспект *LF-DFT* методе, ком приписује њен добар утицај у рачунању побуђених стања комплекса прве серије прелазних метала. Наиме, *LF-DFT* комбинује комплетну интеракцију конфигурација и *Kohn-Sham-DFT*, при чему се и динамичка и статичка корелација узимају у обзир. Такође, рационализовани су недостаци *TD-DFT* методе. Други део (поглавље 4.2) резултата и дискусије посвећен је валидацији различитих популарних *DFA* за геометријску оптимизацију, а затим и тачно одређивање основног спинског стања серије од 18 оксо- (хидроксо-) комплекса гвожђа. У серији испитиваних комплекса, централни метални јон се налази у различитим оксидационим стањима ($Fe^{2+/3+/4+}$), па је самим тим цела серија засићена енергетски блиским спинским стањима. Разлике у спинском мултиплицитету нису биле узете у разматрање током развоја већине *DFA*, па ова валидациона студија за циљ има да пронађе најелегантнији и најтачнији *DFA* за добијање добрих геометрија, као и прецизно одређивање основног спинског стања. У ову сврху, испитано је 6 популарних *DFA* (*LDA*, *PBE-D2*, *BP86-D3*, *S12g*, *S12h*, *B3LYP-D3*). Модерни *DFA*, *S12g*, показао се као најефикаснији за геометријску оптимизацију, као и за недвосмислено одређивање основног спинског стања испитиваних комплекса. У трећем делу (поглавље 4.3), изведена је *EDA* анализа серије оксо- (хидроксо-) модел комплекса гвожђа у различитим оксидационим стањима ($Fe^{2+/3+/4+}$). У првом кораку је геометрија модел комплекса оптимизована, а затим анализирала енергетска декомпозиција основних и побуђених електронских стања ових молекулских система. Одабрани модел системи су

детално анализирани, а посебна пажња је посвећена њиховој сложеној електронској структури и енергетски блиским спинским стањима. У ову сврху корићен је S12g, који се у претходном истраживању показао као најбољи *DFA* за овај тип проблема. Оксо- (хидроксо-) комплекси гвожђа представљају моделе (биомиметике) знатно већих молекулских врста, присутних у биолошким системима, самим тим њихова детаљна анализа води ка формирању нових сазнања о различитим биохемијским процесима.

У **Општем закључку**, кандидат резимира најважније резултате, дата је анализа добијених трендова и дат је предлог одговарајућих корака које треба пратити за прецизно одређивање геометрије и енергије спинских стања аква- и оксо- комплекса прве серије прелазних метала.

Део **Референце** (394 цитата) укључује класичне и најновије научне радове из области прелазних метала, спинских стања, електронских прелаза, спектроскопије, *DFT*-а и анализе енергетске декомпозиције, везаних за ову дисертацију.

Б. Кратак опис постигнутих резултата:

У оквиру ове докторске тезе проучавана је компликована електронска структура аква- и оксо- комплекса прве серије прелазних метала. Испитан је перформанс различитих *DFA* за недвосмислено одређивање основног електронског стања, што је један од најзахтевнијих задатака, како са теоријског, тако и са експерименталног становишта. Употребом теоријских метода, заснованих на *DFT*, израчунате су енергије основних и побуђених електронских стања за одабране комплексе прелазних метала. Примарни изазов је представљало успостављање одговарајућег нивоа теорије, објашњење међусобних односа између структурних особина и металног окружења са електронском структуром, као и рационализација добијених резултата и експерименталних података.

У првом делу су испитане перформансе две различите *DFT* методе (временски зависне теорије функционала густине (*TD-DFT*) и теорије функционала густине засноване на теорији лигандног поља (*LF-DFT*)), за рачунање побуђених стања и репродукцију експериментално добијених апсорпционих спектра серије хексааква комплекса, при чему је централни метални јон био $V^{2+/3+}$, $Cr^{2+/3+}$, $Mn^{2+/3+}$, $Fe^{2+/3+}$, $Co^{2+/3+}$ и Ni^{2+} . Поред перформанси наведене две методе, испитан је и утицај различитих апроксимативних функционала густине. Генерално гледано, *TD-DFT* прорачуни се добро слажу са експериментално добијеним резултатима на скоро свим испитаним нивоима теорије (са мањим или већим одступањима), мада веома греше у случају M06L и SAOP апроксимативних функционала густине. Такође, незадовољавајућа тачност TD-DFT-а запажена је у случајевима $[Ni(H_2O)_6]^{2+}$, $[V(H_2O)_6]^{2+}$ и $[Cr(H_2O)_6]^{3+}$ комплекса, а објашњена одсуством орбиталне релаксације „празних“ орбитала, као и немогућношћу укључивања двоструке ексцитације. LF-DFT метода се показала као знатно супериорнија, на целој серији испитиваних комплекса прелазних метала, и добро је репродуковала све експерименталне спектре. Важно је нагласити да ова метода не показује значајну зависност од одабраног нивоа теорије, што је чини знатно поузданијом за овај тип проблема. Резултати добијени овом методом су упоредиви са резултатима добијеним

високо прецизним *ab initio* прорачунима, а у неким случајевима и супериорнији. Такође, прорачуни урађени *LF-DFT* методом неупоредиво краће трају од *ab initio* прорачуна. Посматрано заједно, резултати овог истраживања охрабрују истраживача да за рачунање *d-d* електронских прелаза користи *LF-DFT*, као једноставну а при томе веома тачну и поуздану теоријску технику.

Основно електронско (спинско) стање, као и енергетски блиска побуђена стања су уско повезана са геометријом молекула. На изглед занемарљиве промене у првој координационој сфери одређеног комплексног једињења, резултују значајним променама у енергији и распореду електронских стања. Испитан је утицај коришћеног нивоа теорије на добијене геометријске параметре серије оксо- (хидроксо-) комплекса гвожђа. У ову сврху је анализирано 18 оксо- (хидроксо-) комплекса насталих координацијом различитих лиганата, а у којима централни јон гвожђа има различито оксидационо стање, а електронско (спинско) стање је експериментално утврђено. У првом кораку је оптимизирана геометрија свих електронских стања, при чему је утврђено да сви комплекси имају високо спинско или интермедијерно спинско електронско стање као основно стање. Од 7 употребљених апроксимативних функционала густине, као најбољи за успешну геометријску оптимизацију показали су се S12g и BP86-D3. Затим је испитана енергетика свих електронских стања, и као најтачнији за недвосмислено одређивање основног електронског (спинског) стања, показали су се OPBE, S12g и SSB-D апроксимативни функционали густине. Посматрани заједно, ови резултати сугеришу да би за успешну оптимизацију као и за тачно одређивање основног електронског (спинског) стања требало користити S12g апроксимативни функционал густине, јер представља и најбољи начин да се у једном кораку добије добра геометрија и тачна енергетика.

Након што је S12g апроксимативни функционал густине окарактерисан као најбољи за геометријске оптимизације, као и за одређивање енергетике електронских (спинских) стања, на самом крају је употребљен и у сврху анализе енергетске декомпозиције (*EDA*) на серији оксо- (хидроксо-) модел комплекса гвожђа. *EDA* техника заснована је на формирању фрагмената у склопу одређене молекулске врсте, и посматрању интеракција између тих фрагмената. На овај начин, могуће је разложити енергију интеракције фрагмената на хемијски смислене доприносе, и логички рационализовати различите аспекте и особине молекулских система. Резултати показују да је најбитнији фактор, одговоран за енергетску диференцијацију (као и особине ових хемијских врста), представља енергија побуђивања, неопходна да се метални јон (који представља први фрагмент) из изолованог електронског стања доведе у електронско стање које поседује у комплексном једињењу. Следећи допринос по важности потиче од орбиталне стабилизације, добијене успостављањем хемијске везе између металног јона и лиганата (други фрагмент) који формирају прву координациону сферу, односно услед ковалентног карактера метал-лиганд везе.

В. Компаративна анализа резултата кандидата са резултатима из литературе:

Апсорпциони спектри комплексних једињења прве серије прелазних метала потичу од електронских прелаза (*d-d* прелаза) лоцираних на металном центру. *DFT* методе су

постале најчешће коришћене теоријске методе за описивање компликоване електронске структуре координационих једињења због изузетно доброг односа између тачности добијених резултата и искоришћеног рачунарског времена. Пронашле су своју примену у одређивању енергија електронских стања, као и енергије електронских прелаза. *DFT* технике, дизајниране за одређивање и детаљно описивање електронских прелаза (*TD-DFT* и *LF-DFT*), прешле су дуг пут како би достигле стадијум у ком се сада налазе. Иако обе технике дају у принципу веома добре резултате, у случају *TD-DFT* се посебна пажња мора обратити на избор нивоа теорије. *LF-DFT*, са друге стране функционише јако добро, а добијени резултати су упоредиви, или често бољи од резултата добијених техникама заснованим на таласној функцији, ко што су *CASSCF*, *SORCI* и *MRCI*. Проблеми у примени *DFT* за описивање електронских (спинских) стања први пут су забележени 2001. године [1] и закључено је да су старији *DFA*, који се заснивају на генерализованом градијенту (*Generalized Gradient Approximation - GGA*) фаворизовали стања са ниским спином, док хибридни функционали, који имају укључен део интеракције измене из *Hartree Fock (HF)* методе, фаворизују стања са високим спином. *Markus Reiher* је покушао да реши овај проблем смањивањем удела *HF*, при чему је формиран *B3LYP**. У наредним годинама, многе *DFA* су показале умерени успех, али углавном неуспехе у покушајима да опишу проблем блиских спинских стања у комплексима прелазних метала. [2, 3] Први *DFA* који је показао значајна побољшања при решавању овог типа проблема био је *OPBE*, након чијег развоја је успешно додата и *Grimme-D₂* дисперзиона енергија, при чему је дизајниран *SSB-D*. Додатна побољшања, у виду нумеричке стабилности, као и додатак *Grimme-D₃* дисперзионе енергије, резултовала су формирањем *S12g*, који се показао као најефикаснији *DFA* за бављење овом тематиком. Развој ових софистицираних *DFA*, као и значајни помаци на пољу компјутерске моћи омогућили су прецизно описивање електронске структуре и њено повезивање са општим особинама молекуларних врста.

Различите истраживачке групе препоручују коришћење различитих *DFA* за геометријске оптимизације [4], као и за проучавање енергија електронских (спинских) стања и електронских прелаза. Са обзиром на то да универзални функционал не постоји, валидација постојећих *DFA* за прецизно одређивање основног и одређивање енергије побуђених електронских (спинских) стања је од велике важности. Сви резултати представљени у овој тези су у складу са резултатима експеримената и/или *ab initio* прорачунима, који се сматрају веома тачним. О актуелности тематике говоре и сва поглавља књиге *Spin States in Biochemistry and Inorganic Chemistry* [5].

[1] Paulsen, H.; Duelund, L.; Winkler, H.; Toftlund, H.; Trautwein, A. X., Free Energy of Spin-Crossover Complexes Calculated with Density Functional Methods. *Inorganic Chemistry* **2001**, 40, 2201-2203.

[2] Harvey, J. N. DFT Computation of Relative Spin-State Energetics of Transition Metal Compounds. In *Principles and Applications of Density Functional Theory in Inorganic Chemistry I*; Springer Berlin Heidelberg: Berlin, Heidelberg, **2004**, pp 151-184.

[3] Cramer, C. J.; Truhlar, D. G., Density functional theory for transition metals and transition metal chemistry. *Physical Chemistry Chemical Physics* **2009**, 11, 10757-10816.

[4] Moltved, K. A.; Kepp, K. P., Chemical Bond Energies of 3d Transition Metals Studied by Density Functional Theory. *Journal of Chemical Theory and Computation* **2018**, 14, 3479-3492.

[5] Swart, M.; Costas, M., *Spin States in Biochemistry and Inorganic Chemistry: Influence on Structure and Reactivity*. Wiley: **2015**.

Г. Научни радови објављени у међународним часописима и саопштења са скупова који су део докторске дисертације:

Резултати истраживања проистекли из ове докторске дисертације објављени су у два рада и једном саопштењу (М64). Оба рада су штампана у међународном часопису, при чему је један М21 а други М22 категорије. Један рад је изабран за насловну страну свеске *International Journal of Quantum Chemistry* марта 2020.

М 21- Радови објављени у врхунским међународним часописима

- 1. Filip Vlahović**, Marko Perić, Maja Gruden-Pavlović, Matija Zlatar, Assessment of TD-DFT and LF-DFT for study of d – d transitions in first row transition metal hexaaqua complexes, *The Journal of Chemical Physics*, **2015**, 142, 214111, DOI: 10.1063/1.4922111

(Импакт фактор (2013) 3.122; Категорија: *Physics, Atomic, Molecular & Chemical* 8/33 у 2013. години).

Линк: <https://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.4922111>

М 22- Радови објављени у истакнутим међународним часописима

- 2. Filip Vlahović**, Maja Gruden, Stepan Stepanovic, Marcel Swart, Density functional approximations for consistent spin and oxidation states of oxoiron complexes, *International Journal of Quantum Chemistry*, **2020**, 120, 5 e26121, DOI: 10.1002/qua.26121

(Импакт фактор (2017) 2.568; Категорија: *Physics, Atomic, Molecular & Chemical* 17/37 у 2017. години).

Линк: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/qua.26121>

М 34- Саопштења са међународних скупова штампана у изводу

- 1. Filip Vlahovic**, Maja Gruden, Marcel Swart, Density Functional Approximation approach for determination of oxidation states and spin states of oxoiron complexes, ECOSTBio fifth Scientific workshop, September 2016, Krakow, Poland, Book of abstracts pp 21.

Д. Провера оригиналности докторске дисертације

Докторанд **Филип Ж. Влаховић**, завршава и брани докторску дисертацију из Хемије на основу Правилника о докторским академским студијама Универзитета у

Београду - Хемијског факултета бр 1557/1 од 12. децембра 2013 године, који не захтева проверу плагијата. Међутим, због добре истраживачке праксе и моралног кодекса, уважен је и Правилник о поступку провере оригиналности докторских дисертација које се бране на Универзитету у Београду (*Гласник Универзитета у Београду* бр. 204/22.06.2018.). Из извештаја генерисаног програмом „*iThenticate*” којим је извршена провера оригиналности докторске дисертације „**Теорија функционала густине у проучавању електронских стања аква- и оксо- комплекса прве серије прелазних метала**“, аутора **Филипа Ж. Влаховић**, констатујемо да утврђено подударње текста износи 14%. Овај степен подударности последица је општих места, личних имена/звања, назива институција/департмана, назива појмова на енглеском језику, као и чињенице да је теза написана на енглеском језику и да су из ње произашла два објављена рада, што је у складу са чланом 9. Правилника. На основу свега изнетог, а у складу са чланом 8. Став 2. Правилника о поступку провере оригиналности докторских дисертација које се бране на Универзитету у Београду, изјављујемо да извештај указује на оригиналност докторске дисертације, те се прописани поступак припреме за њену одбрану може наставити.

Б. Закључак (објашњење научног доприноса докторске дисертације):

На основу свега изложеног, може се закључити да је у поднетој дисертацији под насловом „**Теорија функционала густине у проучавању електронских стања аква- и оксо- комплекса прве серије прелазних метала**“, кандидат **Филип Ж. Влаховић**, самосталним радом успешно одговорио на постављене задатке везане за испитивање електронске структуре комплекса прве серије прелазних метала. Резултати истраживања, проистекли из ове докторске дисертације, публиковани су у два научна рада у врхунском међународним часописима (M21 и M22 категорије), на којима је кандидат први аутор на оба рада, и једном саопштењу на скуповима међународног значаја који је штампан у изводу (M34). Један рад је изабран за насловну страну свеске, што указује на значај добијених резултата.

У дисертацији је детаљно испитана компликована електронска структура аква- и оксо- комплекса прве серије прелазних метала, као и утицај различитих *DFA* на добијене резултате, са циљем проналажења најбољег начина за недвосмислено одређивање основних и побуђених електронска стања. Резултати сугеришу да је најбољи *DFA* за оптимизовање геометрија, али у исто време и прецизно одређивање основног спинског стања *S12g*. У склопу ове дисертације, такође су проучене и енергије електронских прелаза, користећи две различите методе засноване на *DFT* (*TD-DFT* и *LF-DFT*). Добијени резултати показују да се обе методе јако добро слажу са експериментом, али истичу престижност и поузданост *LF-DFT* методе. Показано је такође да се наведене методе могу употребити за знатно брже добијање резултата, који су у складу са резултатима добијеним методама заснованим на таласној функцији. На крају, урађена је и анализа енергетске декомпозиције, при чему је енергија интеракције метала и лиганата рашчлањена на хемијски смислене компоненте и доведена у везу са особинама испитиваних комплексних једињења.

Комисија закључује да су научна истраживања приказана у овој дисертацији у складу са савременим трендовима у области опште и неорганске (теоријске) хемије и да

представљају значајан научни допринос у овој области. Резултати ове докторске дисертације обезбеђују одговарајуће рачунарске протоколе за прецизно одређивање геометрије, енергетике електронских прелаза, основних и побуђених електронских (спинских) стања за аква- и оксо- комплексе прве серије прелазних метала. Такође, разумевање везе између компликоване електронске структуре и одговарајуће геометрије, особина и својстава је путоказ за проучавање координационих једињења прве серије прелазних метала са другим лигандним системима и представља важан фундаментални допринос.

На основу свега изложеног, а у складу са Законом о Универзитету и Статутом Хемијског факултета, Комисија сматра да су испуњени услови за одбрану докторске дисертације и предлаже Наставно-научном већу Универзитета у Београду – Хемијског факултета, да поднету докторску дисертацију **Филипа Ж. Влаховића**, мастер хемичара, под насловом „**Теорија функционала густине у проучавању електронских стања аква- и оксо- комплекса прве серије прелазних метала**“ (**Density functional theory for studying electronic states of aqua- and oxo- first row transition metal complexes**) прихвати и одобри њену јавну одбрану за стицање академског звања Доктора хемијских наука.

Београд,

06.03.2020

Чланови комисије

Др Маја Груден-Павловић, редовни професор
Универзитет у Београду - Хемијски факултет, ментор

Dr. Marcel Swart, ICREA Research professor
Institut de Química Computacional i Catàlisi (IQCC)
University of Girona, Spain, ментор

Др Милош Милчић, ванредни професор
Универзитет у Београду - Хемијски факултет

Др Матија Златар, виши научни сарадник
Универзитет у Београду- ИХТМ, Центар за хемију

Dr. Edwin Otten, Associate professor
Faculty of Science and Engineering, University of Groningen, Netherlands