

УНИВЕРЗИТЕТ У КРАГУЈЕВЦУ
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКОГ ФАКУЛТЕТА

ПРИМЉЕНО: 14. 05. 2015			
Орг. јед.	Број	ПРИЛОЖЕНОС	
05	480/12	-	-

*Универзитет Крагујевац
Можовић*

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

Предмет: Извештај комисије за оцену и одбрану докторске дисертације **Ненада
Јанковића**

На седници Наставно-научног већа Природно-математичког факултета у Крагујевцу, одржаној 06.05.2015. године (број одлуке 340/IX-1), одређени смо у комисију за подношење извештаја о урађеној докторској дисертацији под насловом:

**„Експериментално и теоријско испитивање механизма настајања фенилселено-етара
из неких терпенских алкохола“**

кандидата **Ненада Јанковића**

Ненада Јанковић је поднео рукопис своје докторске дисертације Наставно-научном већу Природно-математичког факултета у Крагујевцу на оцену. Ми смо прегледали рукопис, дали своје сугестије након чега је **Ненад Јанковић** унео све потребне корекције и на основу тога подносимо Наставно-научном већу Природно-математичког факултета у Крагујевцу следећи

ИЗВЕШТАЈ

1. Значај и допринос докторске дисертације

Предмет ове докторске дисертацији јесте експериментално и теоријско испитивање механизма фенилселеноетерификације терпенских алкохола у присуству адитива (Луисових база и киселина). Претпостављени механизам ове реакције потврђен је експерименталним и теоријским методама. Реакција фенилселеноетерификације је веома значајна циклизациона реакција која је нашла примену у разним гранама хемије, а нарочито се користи у тоталним синтезама. Фенилселено-етри показују веома широк спектар биолошких активности. Због значаја ових молекула, значајан напор је усмерен ка развоју нових метода за њихову синтезу.

Први део рада обухвата реакције циклизације одабраних терпенских алкохола са PhSeX (X = Cl, Br) и настајање фенилселено-етара. У циљу побољшања приноса, као и стерео- и региоселективности реакције су извођене у присуству неких Луисових база (Et₃N, Py, Qui и Віру) и киселина (SnCl₂ и CoCl₂) као адитива.

У другом делу овог рада испитативан је утицај примењених адитива на брзину реакције фенилселеноетерификације кинетичким методама на основу чега су добијени подаци о механизму ових реакција а тај механизам је у трећем делу рада потврђен и на молекулском нивоу помоћу теоријских модела: B3LYP/6-311+G(d,p) и M062X/6-311+G(d,p).

У оквиру првог дела изведена је серија реакција фенилселеноетерификације терпенских алкохола помоћу фенилселенил-хлорида и фенилселенил-бромида у присуству адитива (Луисових база и киселина). Показало се да је утицај адитива веома битан и да приноси цикличних етара јако зависе од присуства адитива. Формирана је нова и репрезентативна метода за синтезу цикличних етара у високим приносима. Такође, све изведене реакције су региоселективне и региоспецифичне.

У оквиру другог дела истраживања која су обухваћена овом докторском дисертацијом вршена су испитивања кинетичких аспеката реакција. Измерене су константе брзина реакција циклизације линалола и неролидола помоћу фенилселенил-хлорида и фенилселенил-бромида у присуству адитива (Луисове базе). Показало се да брзина циклизације показује линеарну зависност од рКа вредности примењених Луисових база. Такође је потврђено да је утицај споредне реакције адитива на двоструку везу сведен на минимум.

У трећем делу ове докторске дисертације вршена су квантно-хемијска рачунања помоћу теоријских модела B3LYP/6-311+G(d,p) и M062X/6-311+G(d,p) с циљем да се објасне експериментално добијени резултати (препаративни и кинетички) циклизације линалола и неролидола. Тумачењем резултата добијених оптимизацијом геометрија на оба теоријска модела дошло се до закључка да се циклизационе реакције линалола и неролидола за све примењене адитиве одигравају по *anti* циклизационом путу и то преко два прелазна стања када се узме у обзир утицај контра-јона (хлорид и бромид). Уколико се контра-јон изостави из квантно-хемијских израчунавања (а тако је рађено све до ове докторске дисертације) добија се погрешна слика о механизму реакције, тј. да је *syn* пут повољнији од *anti* пута. Погрешна слика о механизму реакције проистиче из погрешно израчунате енергије солватације, која у случају позитивно наелектрисаних пререакционих комплекса има нереално велике вредности, што је такође први пут описано у овој докторској дисертацији.

Остварени резултати ове докторске дисертације представљају значајан допринос у проучавању механизма фенилселеноетерификације алкохола.

2. Оцена оригиналности научног рада

Кандидат је током истраживања која су описана у овој докторској дисертацији дошао до новог ефикасног поступка за синтезу цикличних етара из терпенских алкохола помоћу органоселенских реагенаса у веома високим приносима. Осим тога, објашњен је утицај катализатора на приносе, брзину реакције циклизације и по први пут је објашњен утицај контра-јона на механизам фенилселеноетерификације алкохола (експериментално и теоријски). Овим сазнањима створена је нова слика о механизму ове реакције.

Оригиналност и актуелност резултата из ове докторске дисертације потврђена је објављивањем три (3) научна рада у угледним научним часописима.

На основу претходно наведеног комисија је закључила да је докторска дисертација резултат оригиналног научног рада кандидата у области Органске хемије.

3. Преглед остварених резултата кандидата у области Органске хемије

Ненад Јанковић је остварио запажене резултате у ужој научној области Органске хемија, који су објављени у облику 5 (пет) научних радова, 6 (шест) саопштења на међународним и националним скуповима и 1 (једне) монографске студије.

3.1. Списак публикованих научних радова

- 3.1.1. M. D. Rvović, V. M. Divac, N. Ž. Janković, Z. M. Bugarčić, *Cyclization of some terpenic alcohols by phenylselenoetherification reaction*, Monatch. Chem. 2013, 144(8), 1227–1231.
M22; IF = 1,629; ISSN: 0026-9247
- 3.1.2. N. Janković, S. Marković, Z. Bugarčić, *DFT study of the mechanism of the phenylselenoetherification reaction of linalool*, Monatch. Chem. 2014, 145, 1287–1296.
M22; IF = 1,629; ISSN: 0026-9247
- 3.1.3. Z. M. Bugarčić, V. M. Divac, M. D. Kostić, N. Ž. Janković, F. W. Heinemann, N. S. Radulović, Z. Z. Stojanović-Radić, *Synthesis, crystal and solution structures and antimicrobial screening of palladium(II) complexes with 2-(phenylselenylmethyl)oxolane and 2-(phenylselenylmethyl)oxane as ligands*, J. Inorg. Biochem. 2015, 143, 9–19.
M21; IF = 3,274; ISSN: 0162-0134
- 3.1.4. S. Marković, N. Janković, Z. Bugarčić, *Influence of the counteranion on the phenylselenoetherification reaction of nerolidol*, Monatch. Chem. 2015, 146, 275–282.
M22; IF = 1,629; ISSN: 0026-9247

- 3.1.5. N. Janković, Z. Bugarčić, S. Marković, *Double catalytic effect of (PhNH₃)₂CuCl₄ in a novel, highly efficient synthesis of 2-oxo and thioxo-1,2,3,4-tetrahydropyrimidines*, J. Serb. Chem. Soc. 2015, 80, 1–13.
M23; IF = 0,889; ISSN: 1820-7421

3.2. Списак саопштења на међународним и националним конференцијама

- 3.2.1. Zorica Bugarčić, Nenad Janković, Marina Kostić, Vera Divac, *A selective conversion of benzylic alcohols to the corresponding carbonyl compounds by means an Ag(III) and Cu(III) complexes*, 4th EuChemS chemistry congress, 2012, Prague, Czech Republic, August 26-30, Chemické Listy, 106, 1276. M34
- 3.2.2. Nenad Janković, Zorica Bugarčić, Aleksandar Teodorović, *Oxidative decarboxylation of some benzylic acids by Cu(III) complexes*, 8th International Conference of the Chemical Societies of the South-East European Countries, 2013, Belgrade, Republic of Serbia, June 27-29, Serbian Chemical Society, 38. M34
- 3.2.3. Nenad Janković, Svetlana Marković, Zorica Bugarčić, *Ispitivanje mehanizma fenilselenoeterifikacije linalola*, Prva konferencija mladih hemičara Srbije, 2012, Beograd, 19. i 20. oktobar, Srpsko hemijsko društvo, 1, 50-53. M64
- 3.2.4. Nenad Janković, Zorica Bugarčić, *Synthesis of novel 1,4-dihydropyrimidines under solvent-free conditions*, 51st Meeting of the Serbian Chemical Society, Niš, Republic of Serbia, June 5-7, 2014, Book of Abstracts, OH P24, p. 114. M64
- 3.2.5. Nenad Janković, Vesna Stanojlović, Jelena Petronijević, Ninko Radenković, *The synthesis and characterization of novel 3,4-dihydroquinoxalin-2(1H)-ones*, 22nd Young Research Fellows Meeting, 2015, Paris, France, February, 4-6, PO-033. M64
- 3.2.6. Ninko Radenković, Vera Divac, Marina Kostić, Nenad Janković, *Synthesis of a new Pd(II) complex with 1,5,5-trimethyl-2-(phenylselanyl)-6-oxa-bicyclo[2.2.2]octane as a ligand*, 22nd Young Research Fellows Meeting, 2015, Paris, France, February, 4-6, PO-014. M64

3.3. Монографска студија

- 3.3.1. Н. Јанковић, *Експериментално и DFT испитивање циклоетерификације линалола*, Библиотека INITIUM, Задужбина Андрејевић, Београд, 2013.
ISBN: 978-86-525-0139-7

4. Оцена испуњености обима и квалитета у односу на пријављену тему

Комисија је закључила да је докторска дисертација кандидата **Ненада Јанковића**, под насловом: „Експериментално и теоријско испитивање механизма настајања **фенилселено-етара из неких терпенских алкохола**“, по обиму и квалитету добијених научних резултата у потпуности испунила предвиђене задатке у оквиру пријављене теме, као и да резултати који су приказани у њој представљају оригинални научни допринос.

5. Научни резултати поднете докторске дисертације

Научни резултати поднете докторске дисертације публиковани су у оквиру 3 (три) научна рада.

- 5.1. M. D. Rvović, V. M. Divac, N. Ž. Janković, Z. M. Bugarčić, *Cyclization of some terpenic alcohols by phenylselenoetherification reaction*, Monatch. Chem. 2013, 144(8), 1227–1231. M22; IF = 1,629; ISSN: 0026-9247
- 5.2. N. Janković, S. Marković, Z. Bugarčić, *DFT study of the mechanism of the phenylselenoetherification reaction of linalool*, Monatch. Chem. 2014, 145, 1287–1296. M22; IF = 1,629; ISSN: 0026-9247
- 5.3. S. Marković, N. Janković, Z. Bugarčić, *Influence of the counteranion on the phenylselenoetherification reaction of nerolidol*, Monatch. Chem. 2015, 146, 275–282. M22; IF = 1,629; ISSN: 0026-9247

6. Примењивост резултата у теорији и пракси

Резултати постигнути током израде ове докторске дисертације су резултати оригиналног научног рада кандидата и могу се сматрати значајним доприносом у области како експерименталне тако и теоријске органске хемије.

7. Примењивост и корисност резултата у теорији и пракси

Постигнути резултати ове докторске дисертације пре свега представљају велики научни допринос у органоселенској хемији. Поступци који су описани представљају опште поступке за синтезу цикличних етара, који се могу поновити у било којој органској лабораторији. Они су јефтини, једноставни и ефикасни.

Такође, представљени резултати дају велики допринос и представљају важан напредак у познавању механизма реакције фенилселеноетерификације, са акцентом на утицај халогена из органоселенског реагенса.

8. Начини презентирања резултата научној јавности

Докторска дисертација је написана на 176 страна (134 нумерисаних + 42 ненумерисане) и садржи: 15 слика, 73 схеме, 18 табела, 25 графика и 168 литературних јединица. Докторска дисертација је подељена на следеће делове: **Увод** (1), **Општи део** (2-41), **Наши радови** (43-94), **Експериментални део** (95-100), **Закључак** (101-102), **Литература** (103-114), **Изводна српском** (114-115) и **енглеском језику (Summary)**, (116-117), **Биографија** (118) и **Прилог** ((120-134) списак и сепарати објављених радова)). У **Уводу** је представљен значај цикличних етара тетрахидрофуранског типа са аспекта њихове биолошке активности. У **Општем делу** представљене су најзначајније синтетичке методе за добијање тетрахидрофурана са литературним подацима. У **Нашим радовима** представљени су остварени резултати и њихово тумачење. У **Експерименталном делу** описани су експериментални поступци за фенилселеноетерификацију терпенских алкохола, спектрална карактеризација добијених цикличних етара, као и примењене квантно-хемијске методе. У **Прилогу** се налази списак и сепарати објављених радова.

Значај ове докторске дисертације потврђен је објављивањем три научна рада (катеорије М22) у међународним научним часописима.

Резултати ће бити презентовани и на јавној одбрани докторске дисертације након прихватања овог извештаја од стране Наставно-научног већа Природно-математичког факултета и Стручног већа за природно-математичке науке Универзитета у Крагујевцу.

ЗАКЉУЧАК

Поднети рукопис докторске дисертације **Ненада Јанковића** под насловом:

„Експериментално и теоријско испитивање механизма настајања фенилселено-етара из неких терпенских алкохола“

представља оригинални научни допринос кандидата изучавању у области Органске хемије. Резултати ове докторске дисертације допринели су новим сазнањима у области синтезе цикличних етара, као и кинетици и механизму фенилселеноетерификације терпенских алкохола (линалол, неролидол и α -терпинеол). Механизми фенилселеноетерификације терпенских алкохола проучавани су експериментално

(препаративно и кинетички) и теоријски (квантно-хемијски). По први пут је описана улога контра-јона на ток и механизам фенилселеноетерификације.

Кандидат је до сада публиковао 5 (пет) научних радова, 6 (шест) саопштења на међународним и националним скуповима и 1 (једну) монографску студију.

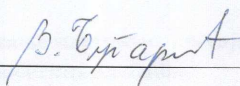
Резултати ове докторске дисертације објављени су у оквиру **три научна рада** у међународним часописима (категирија **M22**).

Имајући у виду претходно наведене чињенице може се закључити да је поднета докторска дисертација **Ненада Јанковића** резултат оригиналног научног рада кандидата у области Органске хемије, чиме су испуњени сви услови за прихватање наведене докторске дисертације и одобравање њене одбране. Стога предлагемо Наставно-научном већу Природно-математичког факултета и Стручном већу за Природно-математичке науке Универзитета у Крагујевцу да кандидату **Ненаду Јанковићу** одобри јавну одбрану докторске дисертације под наведеним насловом.

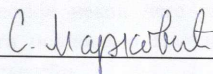
У Крагујевцу и Београду

КОМИСИЈА

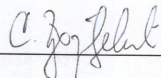
11.05.2015. године



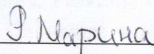
1. Др Зорица Бугарчић, редовни професор (ментор),
Природно-математички факултет, Крагујевац,
Ужа научна област: Органска хемија



2. Др Светлана Марковић, редовни професор,
Природно-математички факултет, Крагујевац,
Ужа научна област: Физичка хемија



3. Др Снежана Ђорђевић, доцент,
Медицински факултет Војномедицинске академије,
Универзитет одбране, Београд
Ужа научна област: Медицинска хемија



4. Др Марина Рвовић, научни сарадник,
Природно-математички факултет, Крагујевац,
Ужа научна област: Хемија