

ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ

ИЗВЕШТАЈ О ОЦЕНИ ДОКТОРСКЕ ДИСЕРТАЦИЈЕ

-обавезна садржина- свака рубрика мора бити попуњена

(сви подаци уписују се у одговарајућу рубрику, а назив и место рубрике не могу се мењати или изоставити)

I ПОДАЦИ О КОМИСИЈИ
<ol style="list-style-type: none"> Датум и орган који је именовео комисију: Наставно-научно веће Природно-математичког факултета Универзитета у Новом Саду, датума 26. јуна 2014. године Састав комисије са назнаком имена и презимена сваког члана, звања, назива уже научне области за коју је изабран у звање, датума избора у звање и назив факултета, установе у којој је члан комисије запослен: <ol style="list-style-type: none"> Проф. др Срђан Ракић, редовни професор, експериментална физика кондензоване материје, 13.02.2014., Департман за физику, Природно-математички факултет, Универзитет у Новом Саду Проф. др Вјекослав Сајферт, редовни професор, теоријска физика кондензоване материје, 7.4.2009., Технички факултет „Михајло Пупин“ у Зрењанину, Универзитет у Новом Саду Академик, проф. др Јован П. Шетрајчић, редовни професор, теоријска физика конензоване материје, 21.11.1996., Департман за физику, Природно-математички факултет, Универзитет у Новом Саду Проф. др Стево К. Јаћимовски, ванредни професор, теоријска физика кондензоване материје, 30.05.2014., Криминалистичко-полицијска академија, Земун
II ПОДАЦИ О КАНДИДАТУ
<ol style="list-style-type: none"> Име, име једног родитеља, презиме: Стеван, Радован, Армаковић Датум рођења, општина, држава: 07.09.1985., Сремска Митровица, Република Србија Назив факултета, назив студијског програма дипломских академских студија – мастер и стечени стручни назив Департман за Физику, Природно-математички факултет, дипломирани физичар Година уписа на докторске студије и назив студијског програма докторских студија 02.02.2011. Докторске студије физике Назив факултета, назив магистарске тезе, научна област и датум одбране: - Научна област из које је стечено академско звање магистра наука:
III НАСЛОВ ДОКТОРСКЕ ДИСЕРТАЦИЈЕ: Моделовање и анализа фундаменталних својстава суманена
IV ПРЕГЛЕД ДОКТОРСКЕ ДИСЕРТАЦИЈЕ: Навести кратак садржај са назнаком броја страна, поглавља, слика, шема, графикона и сл. Број страна: 154, број поглавља: 6, број слика: 67, број табела: 14

V ВРЕДНОВАЊЕ ПОЈЕДИНИХ ДЕЛОВА ДОКТОРСКЕ ДИСЕРТАЦИЈЕ:

У **Уводном** делу дисертације дат је кратак осврт на приступ молекулског моделовања и на основне информације о молекулу који је био предмет истраживања у овој дисертацији. С обзиром да се ради о молекулском моделовању, посебна пажња је посвећена развоју ове области као и о програмским окружењима која се могу користити за ефикасно истраживање физичко-хемијских својстава молекула.

Теоријски део се практично састоји из два сегмента. У првом је дат кратак осврт на својства и потенцијал примене структура из групе једињења под називом молекулски судови и типичног представника ове групе једињења – суманена, док су у другом делу представљене основе теорије функционала густине (ДФТ), у оквиру које су компјутерским методама вршена истраживања фундаменталних својстава молекула суманена. Дате су основне информације о типичним параметрима који фигуришу у поставкама симулација, као што су изменски функционали и базисни скупови.

У поглављу **Коришћене величине и анализе** дат је кратак теоријски осврт на позадину величина и анализа преко којих се вршило истраживање различитих својстава молекула суманена.

Поглавље **Предмет рада** садржи информације о томе која физичко-хемијска својства и који деривати суманена су били истражени у дисертацији.

Поглавље **Резултати и дискусија** садржи анализу добијених резултата који се тичу истраживања ефеката супституције суманена атомима бора и азота, истраживања адсорпционих својстава према молекулима CO, CO₂, NH₃ и H₂ и истраживања ефеката електричног поља.

На основу добијених резултата изведен је и **Закључак** у којем се истиче значајан потенцијал практичне примене молекула суманена и његових деривата у различитим научним областима.

У поглављу **Литература** са детаљним информацијама дат је списак литературних цитата коришћених током израде ове дисертације.

VI СПИСАК НАУЧНИХ И СТРУЧНИХ РАДОВА КОЈИ СУ ОБЈАВЉЕНИ ИЛИ ПРИХВАЋЕНИ ЗА ОБЈАВЉИВАЊЕ НА ОСНОВУ РЕЗУЛТАТА ИСТРАЖИВАЊА У ОКВИРУ РАДА НА ДОКТОРСКОЈ ДИСЕРТАЦИЈИ

Рад у врхунском међународном часопису M21

1. Stevan Armaković, Sanja J. Armaković, Jovan P. Šetrajić, Igor J. Šetrajić. (2012) Active components of frequently used β -blockers from the aspect of computational study. *Journal of molecular modeling*, 18, 4491. (IF: 1,98)
2. Stevan Armaković, Sanja J. Armaković, Jovan P. Šetrajić, Ljubiša D. Džambas. (2013) Specificities of boron disubstituted sumanenes. *Journal of molecular modeling*, 19, 1153. (IF: 1,98)
3. Stevan Armaković, Sanja J. Armaković, Jovan P. Šetrajić. (2013) Hydrogen storage properties of sumanene. *International Journal of Hydrogen Energy*, 38, 12190. (IF: 4,05)
4. Stevan Armaković, Sanja J. Armaković, Jovan P. Šetrajić, Stevo K. Jaćimovski, Vladimir Holodkov. (2014) Sumanene and its adsorption properties towards CO, CO₂ and NH₃ molecules. *Journal of Molecular Modeling*, 20, 1. (IF: 1,98)

Рад у истакнутом међународном часопису M22

1. Stevan Armaković, Sanja J. Armaković, Jovan P. Šetrajić, Igor J. Šetrajić. (2013) Optical and bowl-to-bowl inversion properties of sumanene substituted on its benzylic positions; A DFT/TD-DFT study. *Chemical Physics Letters*, 578, 156. (IF: 2,34)

VII ЗАКЉУЧЦИ ОДНОСНО РЕЗУЛТАТИ ИСТРАЖИВАЊА

Резултати представљени у овој докторској дисертацији указују на велик потенцијал практичне примене суманена у различитим областима науке и технике – од органске електронике до енергетике. Чињеница да су хетерофулерени и деривати суманена са хетеро-атомима већ успешно синтетисани, послужила је као један од главних мотива за истраживање ефеката моно и дисупституције суманена атомима бора и азота. Резултати указују на могућност манипулисања главним структурним својством молекулских судова, њиховом дубином. Вредности квантно-молекулског дескриптора који описује стабилност имају високе вредности, указујући на могућност њиховог скорог синтетисања.

Испитивање ароматичности суманена је имало значајну пажњу, јер је по први пут истражена

ароматичност његових прстенова. Супституција атомима бора и азота доводи до значајних промена овог параметра, што би могло да буде од велике важности када се ради о феноменологији π -слагања, директно одговорној за примену суманена као електрично-активног једињења. Утврђено је и да се корелација између дубине суда и промене ароматичности дуж висине суда, а то је уједно и дуж осе π -слагања, може одлично описати четвртим степеном дубине суда.

Кроз истраживање ефеката супституције, бензилчне позиције суманена су поново истакнуте као веома значајно структурно својство суманена, јер омогућавају ефикасну модификацију и функционализацију суманена. Истражена су оптичка својства суманена, конкретно УВ апсорпциона својства, нелинеарна оптичка својства, као и енергија везивања екситона. Добијени резултати указују на могућност добијања деривата суманена који су оптички активни и у видљивом делу спектра, што је од великог значаја за њихову практичну примену. Такође, параметар који описује нелинеарна оптичка својства, хиперполаризибилност, много је виши од вредности за референтни молекул урее, што је изузетно битно за потенцијалну примену суманена и његових деривата као нелинеарних оптичких медијума.

НБО анализа је указала на најбитније интеракције међу НБО орбиталама, а од посебног интереса су нам биле НБО орбитале хетеро-атома „уведених“ у структуру суманена. Енергије делокализације интеракција поменутих НБО орбитала имају значајно високе вредности које доприносе стабилизацији молекула, а то је још један показатељ да би ове структуре у скорије време могле бити синтетисане.

Феномен инверзије суманена, описан инверзионом баријером, је од посебног значаја за практичну примену суманена у органској електроници. Добијени резултати указују да се овом величином у великој мери може ефикасно манипулисати путем супституције бензилчних позиција суманена, а у мањој мери применом различитих растварача. Када се ради о овој феноменологији, битан закључак јесте и да је он, баш као и параметар ароматичности, искључиво зависан од четвртог степена дубине суда, док је дубина суда зависна само од димензија супституената.

Имајући у виду значај органских једињења у сврхе заштите животне средине, испитана су адсорпциона својства суманена према молекулима водоника, угљен-моноксида, угљен-диоксида и амонијака. Са енергетског аспекта, адсорпција водоника је већ неко време од велике важности, јер се константно трага за органским једињењима која имају енергију адсорпције у повољном интервалу. Под тим се подразумевају оне вредности енергије везивања које обезбеђују и адсорпцију и десорпцију молекула водоника у лако остварљивим експерименталним условима. Показано је да суманен адсорбује молекуле водоника и да је енергија везивања реда величине која одговара механизму физисорпције.

Показано је да је и релативно висок диполни момент, који је последица специфичне расподеле наелектрисања услед геометрије суда, одговоран за повољна адсорпциона својства суманена према наведеним молекулима. Утврђено је да су боља адсорпциона својства резервисана за конкавну страну суманена, јер је тамо и лоцирано више негативног наелектрисања.

Преко неколико приступа, од којих су се као посебно повољни показали анализа густине стања и НБО анализа, потврђен је механизам физисорпције. НБО анализа је нарочито повољна код испитивања механизма адсорпције СО молекула, којег угљеничне нанотубе не могу да адсорбују.

С обзиром да постоји много примера где су електронска својства органских структура значајно побољшана дејством спољашњег електричног поља, испитан је и ефекат спољашњег електричног поља на својства суманена. Када се ради о дејству електричног поља, од посебног значаја је било сазнање да се поларизација наелектрисања у великој мери повећава – диполни момент се, чак, удеветостручује, у испитаном интервалу јачине електричног поља. Ово би требало да значајно унапреди адсорпциона својства суманена према испитаним молекулима.

На могућност побољшања адсорпционих својстава дејством електричног поља такође, указују и квантно-молекулски дескриптори, јер се моћ привлачења електрона, описана електрофиличношћу, повећава за скоро 70%. Поново се показало да се дубином суманена може манипулисати, овога пута електричним пољем, док је индикатор стабилности и даље висок указујући на то да под дејством електричног поља у наведеном интервалу структура суманена опстаје.

VIII ОЦЕНА НАЧИНА ПРИКАЗА И ТУМАЧЕЊА РЕЗУЛТАТА ИСТРАЖИВАЊА

Комисија дели став да се проблематици приступило адекватно и да је начин приказа и тумачења резултата истраживања у складу са модерним захтевима научно-истраживачке делатности.

Од стране кандидата је учињена правилна синтеза и студија великог броја теоријских и експерименталних података, што му је директно омогућило прегледност научних чињеница и адекватну компарацију добијених резултата истраживања.

Добијени резултати су оригинално изложени, док сав материјал прати адекватно тумачење научних чињеница.

<p>IX КОНАЧНА ОЦЕНА ДОКТОРСКЕ ДИСЕРТАЦИЈЕ: Експлицитно навести да ли дисертација јесте или није написана у складу са наведеним образложењем, као и да ли она садржи или не садржи све битне елементе. Дати јасне, прецизне и концизне одговоре на 3. и 4. питање:</p>
<p>1. Да ли је дисертација написана у складу са образложењем наведеним у пријави теме Да – Комисија дели мишљење да је ова докторска дисертација урађена у складу са образложењима наведеним у пријави теме.</p>
<p>2. Да ли дисертација садржи све битне елементе Да – Комисија дели мишљење да дисертација садржи дефинисане теме истраживања, преглед познатих истраживања, јасан приказ добијених резултата и њихову дискусију, приказ приступа истраживања, списак литературе, закључак и прилог.</p>
<p>3. По чему је дисертација оригиналан допринос науци Комисија дели мишљење да је ова докторска дисертација настала на основу истраживања кандидата и да садржи све елементе оригиналног научног истраживања. Оригиналан научни допринос се огледа у добијању и тумачењу нових научних чињеница у вези са молекулом суманена, које до момента публикација од стране кандидата нису биле познате научно-истраживачкој заједници. Оригинални научни допринос се односи на резултате који указују на то да се супституцијом суманена повољно може утицати на инверзиону баријеру, ароматичност прстенова, оптичка и нелинеарна оптичка својства. Резултати истраживања указују и на повољна адсорпциона својства суманена, што у случајевима уобичајених атмосферских полутаната (CO, CO₂ и NH₃) може допринети развоју метода њихове елиминације из атмосфере, док се у случајевима адсорпције молекула водоника даје конкретан допринос у решавању проблема у вези са енергетиком. Добити резултати указују и на повољну промену својстава суманена применом слабог спољашњег електричног поља, чији се интензитет лако практично остварује. Испитано је преко 30 структура, а резултати изложени у дисертацији су засновани на више стотина симулација. Део резултата из дисертације је публикован у четири рада категорије M21 и једном раду категорије M22, чиме је јасно испоштован критеријум оригиналности научног истраживања кандидата.</p>
<p>4. Недостаци дисертације и њихов утицај на резултат истраживања Комисија дели мишљење да ова докторска дисертација нема релевантних недостатака, имајући у виду да су у целини испоштовани сви постављени циљеви и критеријуми.</p>
<p>X ПРЕДЛОГ: На основу укупне оцене дисертације, комисија предлаже:</p>
<p>Да се докторска дисертација под називом: „Моделовање и анализа фундаменталних својстава суманена“ прихвати, а кандидату Стевану Армаковићу одобри одбрана.</p>

Датум: 10. јул 2014. године

НАВЕСТИ ИМЕ И ЗВАЊЕ ЧЛАНОВА КОМИСИЈЕ
ПОТПИСИ ЧЛАНОВА КОМИСИЈЕ

Проф. др Срђан Ракић, редовни професор
(председник комисије)

Проф. др Вјекослав Сајферт, редовни професор
(члан комисије)

Академик, проф. др Јован П. Шетрајчић, редовни професор
(члан комисије)

Проф. др Стево К. Јаћимовски, ванредни професор
(члан комисије)