

УНИВЕРЗИТЕТ У НОВОМ САДУ

ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ

ИЗВЕШТАЈ О ОЦЕНИ ДОКТОРСKE ДИСЕРТАЦИЈЕ

I ПОДАЦИ О КОМИСИЈИ
<ol style="list-style-type: none">1. Датум и орган који је именовao комисију Наставно-научно веће Природно-математичког факултета у Новом Саду на 39. седници одржаној 17. септембра 2015.2. 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: Др Вукадин Леовац, професор емеритус, неорганска хемија, 12.02.2015. Универзитет у Новом Саду, председник Др Слађана Новаковић, виши научни сарадник, неорганска хемија, 29.05.2013. Институт за нуклеарне науке "Винча", Универзитет у Београду, ментор Др Љиљана Војиновић Јешић, ванредни професор, неорганска хемија, 09.11.2012. Природно-математички факултет у Новом Саду, ментор Др Горан Богдановић, научни саветник, неорганска хемија, 11.07.2007. Институт за нуклеарне науке "Винча", Универзитет у Београду Др Бојана Остојић, виши научни сарадник, хемија, 30.10.2013. Институт за хемију, технологију и металургију, Универзитет у Београду
II ПОДАЦИ О КАНДИДАТУ
<ol style="list-style-type: none">1. Име, име једног родитеља, презиме: Бојана, Милан, Француски2. Датум рођења, општина, држава: 14.01.1979. Београд, Република Србија3. Назив факултета, назив студијског програма дипломских академских студија – мастер и стечени стручни назив4. Година уписа на докторске студије и назив студијског програма докторских студија5. Назив факултета, назив магистарске тезе, научна област и датум одбране: Технолошко-металуршки факултет у Београду, "Структурне карактеристике никал(II) комплекса са три- и тетрадентатним лигандима на бази изотиосемикарбазида", хемија, 19.02.2007.6. Научна област из које је стечено академско звање магистра наука: Хемија
III НАСЛОВ ДОКТОРСKE ДИСЕРТАЦИЈЕ:
Електростатичка својства атома сумпора у дериватима тиосемикарбазида
IV ПРЕГЛЕД ДОКТОРСKE ДИСЕРТАЦИЈЕ:
Докторска дисертација под насловом Електростатичка својства атома сумпора у дериватима тиосемикарбазида написана је на (221) страна, а садржај је подељен на 7 поглавља и прилоге. Треба рећи да дисертација садржи укупно (без прилога) 26 табела и 81 слику. Делови дисертације су: Увод (2 страна), Теоријски део (26 страна), Експериментални

део (24 стране), Резултати и дискусија (94 стране), Закључак (6 страна), Conclusion (6 страна) и Литература (4 стране). Дисертација се завршава са два прилога, први садржи 20 табела (38 страна) и други садржи 16 слика (21 страна).

V. ВРЕДНОВАЊЕ ПОЈЕДИНИХ ДЕЛОВА ДОКТОРСКЕ ДИСЕРТАЦИЈЕ:

У **Уводу** је укратко објашњен предмет и циљ истраживања. **Теоријски део** дисертације је подељен у четири потпоглавља. У првом потпоглављу описане су основне структурне карактеристике деривата тиосемикарбазида. Друго потпоглавље је посвећено кратком прегледу досадашњих дефиниција и начина карактерисања водоничних веза, као и примерима који са аспекта геометријских критеријума указују на значајна акцепторска својства атома сумпора. У трећем потпоглављу изложене су теоријске основе анализе расподеле електронске густине добијене из експерименталне дифракције рендгенског зрачења високе резолуције, док је у четвртном потпоглављу дат преглед литературе која се односи на резултате рендгенске структурне анализе високе резолуције у једињењима која садрже тиосемикарбазидни, тиoureидо и тиоамидни фрагмент. У **Експерименталном делу** представљени су експериментални резултати рендгенске структурне анализе високе резолуције као и детаљна процедура одређивања расподеле густине наелектрисања методом мултипол-утацавања. Поглавље **Резултати и дискусија** обухвата четири потпоглавља, у којима су изложени резултати анализе експериментално и теоријски добијене расподеле густине наелектрисања два деривата тиосемикарбазида, 4-метил-3-тиосемикарбазид (MeTSC) и 4-метил-3-тиосемикарбазон 2-пиридинформамида (TSC4). Поред описа електронске густине подробно су дискутоване тополошке карактеристике хемијских веза и интеракција и електростатичка својства молекула како експерименталних тако и теоријских модела. У овим потпоглављима који се односе на експерименталне и теоријске моделе посебна пажња је посвећена сагледавању способности атома сумпора као акцептора у водоничним везама. У **Закључку** рада систематизовани су и истакнути резултати истраживања електростатичких својстава атома сумпора у дериватима тиосемикарбазида. Поглавље **Conclusion** представља адекватан превод закључка на енглески језик. Поглавље **Литература** садржи релевантне радове новијег датума објављене у водећим часописима међународног значаја. Цитирана литература се односи на хемију тиосемикарбазида као и на различите молекуле који су описани са аспекта расподеле густине наелектрисања.

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

Радови публиковани у врхунским међународним часописима, категорија **M21**

1. **B. M. Francuski**, S. B. Novaković, G. A. Bogdanović, “Electronic features and hydrogen bonding capacity of the sulfur acceptor in thioureido-based compounds. Experimental charge density study of 4-methyl-3-thiosemicarbazide”, CrystEngComm, 2011, **13**, 3580.

Радови публиковани у међународним часописима, категорија **M23**

2. **B. M. Francuski**, S. B. Novaković, B. D. Ostojić, D. D. Francuski, G. A. Bogdanović “Electronic features and hydrogen bonding capacity of the sulfur acceptor in thioureido-based compounds. Part 2. Further insight by theoretical charge density study“, Computational and Theoretical Chemistry, 2015, **1067**, 93.

Саопштења са међународних скупова штампана у изводу, категорија **M34**

3. S. B. Novaković, **B. M. Francuski**, G. A. Bogdanović: “Influence of the dissimilar crystalline environments on the electronic features of two crystallographically independent molecules. The results of the charge density analysis”, Book of abstracts, Solid state chemistry, 2010, Prague, p. 47.
4. **B. M. Drašković**, S. B. Novaković, G. A. Bogdanović, A. Spasojević-de Biré: “Noncovalent

interactions in the crystal structure of 4-methyl-3-thiosemicarbazide. The results of the experimental charge density analysis”, Book of abstracts, Humboldt Conference on Non-Covalent Interactions, 2007, Vršac, p. 56.

Саопштења са домаћих скупова штампана у изводу, категорија **M64**

5. **B. M. Francuski**, Đ. Francuski, S. B. Novaković, G. A. Bogdanović: “Acceptor abilities of the sulfur atom in the thiosemicarbazide molecule. DFT study”, Book of abstracts, XXI Conference of the Serbian Crystallographic Society, 2014, Zlatibor, p. 90-91.
6. **B. M. Drašković**, S. B. Novaković, G. A. Bogdanović “Electronic properties of the sulfur atom in the 4-methyl-3-thiosemicarbazide”, Book of abstracts, XV Conference of the Serbian Crystallographic Society, 2008, Donji Milanovac, p. 25-26.
7. **B. M. Drašković**, S. B. Novaković, G. A. Bogdanović, A. Spasojević-de Biré “Low temperature high resolution X-ray diffraction data for 4-methyl-3-thiosemicarbazide”, Book of abstracts, XIV Conference of the Serbian Crystallographic Society, 2007, Vršac, p. 36-37.

VII ЗАКЉУЧЦИ ОДНОСНО РЕЗУЛТАТИ ИСТРАЖИВАЊА

На основу експерименталних података добијених рендгенском структурном анализом високе резолуције и применом мултипол-утачњавања испитана су електронска својства два деривата тиосемикарбазида, MeTSC и TSC4. Одређени су: деформациона електронска густина хемијских веза и слободних електронских парова, тополошке карактеристике укупне електронске густине, електростатички потенцијал молекула и наелектрисања атома. Посебна пажња је посвећена испитивању електростатичких својстава атома сумпора у овим једињењима. Закључено је да атом сумпора има изразиту флексибилност и способност да прилагоди своју електронску густину слободних електронских парова просторном распореду донорних група које учествују у интеракцијама са S-акцептором.

У циљу употпуњавања експерименталних резултата анализирана је теоријски добијена густина наелектрисања оба молекула, а затим су испитиване карактеристике сумпора као акцептора и то у системима различите комплексности полазећи од изолованих мономера, преко издвојених димер до кристалног окружења. Овом анализом је утврђено да се симултаним ангажовањем тиoureидо S атома у више интеракција не умањује његова акцепторска способност као и да се ове интеракције могу међусобно подржавати без стерних сметњи. Водоничне везе које укључују S акцептор у теоријским моделима димера MeTSC и TSC4 испитване су са аспекта енергијских својстава, при чему су одређене електростатичке енергије, кохезионе енергије, као и енергија система на основу *ab initio* CCSD(T) методе. На основу анализе енергија интеракција у којима тиoureидо S атом учествује као акцептор закључено је да се атом сумпора, с обзиром да учествује истовремено у више слабих до умерених водоничних веза, може сматрати значајним акцептором јер је укупан енергијски допринос његових интеракција сличан или не много мањи од енергијског доприноса карбонилног кисеоника.

VIII ОЦЕНА НАЧИНА ПРИКАЗА И ТУМАЧЕЊА РЕЗУЛТАТА ИСТРАЖИВАЊА

Резултати приказани у докторској дисертацији су на систематичан начин изложени, што се може оценити као веома успешно. Јасно и концизно тумачење резултата је урађено у складу са најновијом литературом из области експерименталне анализе густине наелектрисања, што указује да је кандидат добро упознао проблематику, те извео релевантне и научно коректне закључке. Стога се начин приказа и тумачења резултата истраживања оцењује високом оценом.

IX КОНАЧНА ОЦЕНА ДОКТОРСKE ДИСЕРТАЦИЈЕ:	
1.	Дисертација је написана у складу са образложењем наведеним у пријави теме. Посебно високу оцену заслужују додатни резултати, који се односе на акцепторске способности атома сумпора у теоријским моделима, а који нису били предвиђени пријавом теме.
2.	Дисертација садржи све битне елементе.
3.	Докторска дисертација представља оригиналан допринос науци у области структурне хемије. Дисертација приказује прецизне информације о дериватима тиосемикарбазида на нивоу електронске густине, са посебним освртом на атом сумпора, као важним акцептором који заслужује додатну пажњу у разматрању његове улоге у биолошким системима.
4.	Докторска дисертација по нашем мишљењу нема значајних недостатака.
X ПРЕДЛОГ:	
На основу укупне оцене дисертације, комисија предлаже да се докторска дисертација под насловом " Електростатичка својства атома сумпора у дериватима тиосемикарбазида " прихвати, а кандидату мр Бојани Француски одобри одбрана.	

ЧЛАНОВИ КОМИСИЈЕ:

Др Вукадин Леовац, професор емеритус
Универзитета у Новом Саду, председник

Др Слађана Новаковић, виши научни сарадник
Института за нуклеарне науке "Винча",
Универзитета у Београду, ментор

Др Љиљана Војиновић Јешић, ванредни професор
Природно-математичког факултета, Универзитета у
Новом Саду, ментор

Др Горан Богдановић, научни саветник
Института за нуклеарне науке "Винча",
Универзитета у Београду

Др Бојана Остојић, виши научни сарадник
Института за хемију, технологију и металургију,
Универзитета у Београду