

# NASTAVNO-NAUČNOM VEĆU HEMIJSKOG FAKULTETA UNIVERZITETA U BEOGRADU

Na redovnoj sednici Nastavno-naučnog veća Hemijskog fakulteta Univerziteta u Beogradu, održanoj 9.04.2015. godine, određeni smo za članove Komisije za pregled, ocenu i odbranu doktorske disertacije Ljubice Andđelković, mastera hemičara, istraživača saradnika Centra za hemiju, Instituta za hemiju, tehnologiju i metalurgiju, Univerziteta u Beogradu, pod naslovom:

„Teorijsko proučavanje *Jahn-Teller-ovog efekta i njegovog uticaja na osobine hemijskih sistema“*

„Theoretical investigation of the Jahn-Teller effect and the influence of the Jahn-Teller distortion on the properties of chemical systems“

Posle pregleda doktorske disertacije kandidata Ljubice Andđelković, podnosimo Nastavno-naučnom veću Hemijskog fakulteta Univerziteta u Beogradu sledeći

## I Z V E Š T A J

### A. Prikaz sadržaja doktorske disertacije:

Doktorska disertacija kandidata Ljubice Andđelković, pod gore navedenim naslovom, napisana je na 179 strana A4 formata (prored 1,5) u okviru koje se nalaze 60 Slika i 33 Tabele. Doktorska disertacija je napisana na engleskom jeziku i sadrži sledeća poglavlja: *Uvod* (4 strane); Opšti deo podeljen u četiri poglavlja: *Teorija vibronske sprege* (22 strane), *Teorija funkcionala gustine* (eng. *Density Functional Theory*, DFT) (13 strana), *Aromatičnost* (3 strane) i *Ekscitonska sprega* (5 strana); Rezultate i diskusiju podeljene u četiri poglavlja: *Izbor funkcionala pri određivanju Jahn-Teller-ovih parametara DFT metodom* (10 strana), *Problem uticaja većeg broja Jahn-Teller aktivnih vibracija* (42 strane), *Uticaj Jahn-Teller-ovog efekta*

*na aromatičnost* (36 strana) i *Jednostavni model Hamiltonian zasnovan na osobinama monomera koji kombinuje teorije ekscitonske i vibronske sprege* (25 strana); *Opšti zaključak* (4 strane); *Literatura* (15 strana, 424 citata). Pored navedenog disertacija sadrži Zahvalnicu, Rezime na engleskom i srpskom jeziku, Sadržaj i Biografiju autora na engleskom i srpskom jeziku.

U **Uvodu** je istaknut značaj *Jahn-Teller*-ovog (JT) efekta; opisan je multideterminantni DFT pristup za analizu JT efekta; model Svojstvenog Puta Distorzije (eng. *Intrinsic Distortion Path*, IDP) koji se koristi za analizu JT aktivnih molekula kod kojih je veći broj vibracija odgovoran za JT distorziju; kao i uticaj JT efekta na aromatičnost i eksitonsku spregu.

**Opšti deo** obuhvata četiri odeljka. U prvom delu **Opšteg dela** kandidat daje detaljan opis teorije vibronske sprege, korelacije između elektronskih stanja i molekulskih vibracija. Najpoznatiji koncept koji se zasniva na ovoj teoriji je JT efekat. Prema JT teoremi svi nelinearni molekuli sa degenerisanim elektronskim stanjem spontano se distorguju duž vibracija koje nisu totalno simetrične, pri čemu dolazi do uklanjanja degeneracije uz sniženje energije. Vibronska sprega opisuje sve spontane distorzije molekulskih sistema i odnosi se na JT efekat, *Renner-Teller*-ov efekat i pseudo JT efekat. Mnogi fenomeni kao što su superkonduktivnost, piezoelektričnost, feroelektrični fazni prelazi, magnetne osobine, stereohemija, reaktivnost i struktura molekula, u bliskoj su vezi sa vibronskom spregom. U drugom delu **Opšteg dela** dati su teorijski aspekti Teorije funkcionala gustine. Treći deo **Opšteg Dela** obuhvata osvrt na aromatičnost, osobinu molekulskih sistema koja se u velikoj meri koristi za intuitivno opisivanje hemijske veze. U četvrtom delu **Opšteg dela** prikazana je teorija eksitonske sprege. Eksitonska sprega i prenos energije eksitacije su univerzalne pojave koje regulišu fotosintezu kod biljaka i bakterija, ali su svakako odgovorne i za uspeh novih fotonaponskih uređaja.

**Rezultati i diskusija** podeljeni su u četiri dela. Prvi deo obuhvata primenu multideterminantnog DFT pristupa za određivanje JT parametara. Analizirani su ciklobutadienil radikal katjon ( $C_4H_4^{+}$ ), ciklopentadienil radikal ( $C_5H_5^{\bullet}$ ), benzen katjon ( $C_6H_6^{+}$ ), benzen anjon ( $C_6H_6^{-}$ ), tropil radikal ( $C_7H_7^{\bullet}$ ), anjoni i katjoni koronulena i koronena, mali metalni i metaloidni klasteri ( $Na_3$ ,  $Ag_3$ ,  $As_4^-$ ,  $Sb_4^-$ ), heksafluorokuprat(II) jon ( $[CuF_6]^{4-}$ ), helatni kompleks mangana ( $[Mn(acac)_3]$ ) i organometalno jedinjenje kobaltocen ( $CoCp_2$ ). Prikazano je sistematsko ispitivanje različitih DFT funkcionala za izračunavanje JT parametara i poređenje sa dostupnim eksperimentalnim podacima iz literature. Drugi deo **Rezultata i diskusije** posvećen je problemu uticaja većeg broja JT aktivnih vibracija. Rezultati dobijeni

pomoću IDP modela u kome se JT distorzija izražava kao linearna kombinacija svih totalno simetričnih normalnih vibracija u strukturi niže simetrije, su prikazani za kvadratno-planarne klasterne arsena i antimona,  $\text{As}_4^-$  i  $\text{Sb}_4^-$ , ciklopentadienil radikal, benzen katjon, benzen anjon, tropil radikal, kao i anjone i katjone koranulena i koronena,  $\text{C}_{20}\text{H}_{10}^-$ ,  $\text{C}_{20}\text{H}_{10}^+$ ,  $\text{C}_{24}\text{H}_{12}^-$  i  $\text{C}_{24}\text{H}_{12}^+$ . Treći deo **Rezultata i diskusije** obuhvata ispitivanje uticaja JT distorzije na aromatičnost katjona i anjona benzena, ciklopentadienil radikala, kobaltocena, fuleren katjona i anjona, i kvadratno-planarnih klastera arsena i antimona. Poslednji odeljak **Rezultata i diskusije** opisuje novi model Hamiltonian koji kombinuje teorije ekscitonske i vibronske sprege. Validnost modela je ispitivana na model sistemu, dimeru benzena.

U odeljku **Opšti zaključak** kandidat sumira zaključke izračunavanja JT parametara i analize JT distorzije, kao i posledice distorzije na aromatičnost i ekscitonske spregu. Uočeno je da JT efekat utiče na smanjenje antiaromatičnosti ispitivanih sistema. Takodje, novo razvijeni model koji uključuje teorije ekscitonske i vibronske sprege, bazira se na osobinama monomera, i može se primeniti za analizu komplikovanih realnih hromofora.

Odeljak **Literatura** (424 citata) obuhvata klasične i najnovije radeve iz oblasti JT efekta, DFT metoda, aromatičnosti i ekscitonske sprege.

### B. Kratak opis postignutih rezultata:

U okviru ove doktorske disertacije analiziran je JT efekat i izračunati su JT parametri za ciklobutadienil radikal katjon ( $\text{C}_4\text{H}_4^+$ ), ciklopentadienil radikal ( $\text{C}_5\text{H}_5^\cdot$ ), benzen katjon ( $\text{C}_6\text{H}_6^+$ ), benzen anjon ( $\text{C}_6\text{H}_6^-$ ), tropil radikal ( $\text{C}_7\text{H}_7^\cdot$ ), anjone i katjone koranulena i koronena, male metalne i metaloidne klasterne ( $\text{Na}_3$ ,  $\text{Ag}_3$ ,  $\text{As}_4^-$ ,  $\text{Sb}_4^-$ ), heksafluorokuprat(II) jon ( $[\text{CuF}_6]^{4-}$ ), helatni kompleks mangana ( $[\text{Mn}(\text{acac})_3]$ ) i organometalno jedinjenje kobaltocen ( $\text{CoCp}_2$ ) primenom multideterminantnog DFT pristupa. Ispitivan je uticaj različitih funkcionala (LDA, BP86, BLYP, OPBE i B3LYP) pri izračunavanju JT parametara. JT distorzija je posledica elektronskih faktora, ali takođe bitno zavisi i od geometrije ispitivanog molekula. Iako je izbor DFT funkcionala direktno povezan sa konkretnim hemijskim problemom, pri analizi JT distorzije, svi ispitivani funkcionali daju kvalitativno zadovoljavajuće rezultate.

Izvedena je analiza uticaja većeg broja vibracija odgovornih za distorziju molekula primenom IDP modela u kvadratno-planarnim klasterima arsena i antimona,  $\text{As}_4^-$  i  $\text{Sb}_4^-$ ,  $\text{C}_5\text{H}_5^\cdot$ ,  $\text{C}_6\text{H}_6^+$ ,  $\text{C}_6\text{H}_6^-$ ,  $\text{C}_7\text{H}_7^\cdot$ , kao i anjonima i katjonima koranulena i koronena,  $\text{C}_{20}\text{H}_{10}^-$ ,  $\text{C}_{20}\text{H}_{10}^+$ ,  $\text{C}_{24}\text{H}_{12}^-$  i  $\text{C}_{24}\text{H}_{12}^+$ . Sve potrebne informacije pri izračunavanju koeficijenata vibronske sprege sadržane su u strukturi minimalne energije. Opisan je i način korelacije normalnih modova u

strukturi minimalne energije sa normalnim modovima u višoj simetriji, saglasno epikernel principu. Ovim modelom moguće je direktno odvojiti doprinose različitih vibracija JT distorziji, njihov energetski doprinos JT stabilizacionoj energiji duž puta distorzije i odrediti sile zaslužne za JT distorziju, dajući bolji uvid u poreklo i mehanizam vibronske sprege. Distorzija je uvek vođena vibracijama koje ispunjavaju simetrijske uslove na osnovu JT teoreme. Ako postoji više JT aktivnih vibracija, vibracije većih frekvencija dominiraju na početku distorzije jer smižavaju energiju molekula na najefikasniji način, dok su vibracije nižih frekvencija važne u drugom delu distorzije, vodeći molekul do konformacije minimalne energije. Dakle, u analizi JT efekta moraju se uključiti sve JT aktivne vibracije.

Ispitivana je aromatičnost benzen katjona i anjona, ciklopentadienil radikala, kobaltocena, fulerena koji podležu JT distorziji i kvadratno-planarnim anjonskim klasterima arsena i antimona. JT distorzija predstavlja jedinstveni mehanizan sniženja antiaromatičnosti JT aktivnih molekula. Za potpuno razumevanje aromatičnosti JT aktivnih molekula, neophodno je uključiti i detaljnu analizu JT efekta. Analiza izvedena u okviru ove doktorske disertacije omogućava predviđanja svojstava mnogih aromatičnih sistema, od malih organskih i neorganskih molekula, do fulerena i komplikovanih nano-struktura.

Razvijen je model koji kombinuje ekscitonsku spregu i molekulske vibracije, odnosno proučavana je ekscitonska sprega iz JT perspektive. Ekscitonsko kuplovanje je analizirano u model sistemu – dimeru benzena i izvedena je validacija razvijenog modela. Svrha razvijenog modela jeste da se razumeju i predvide osobine spregnutih hromofora preko svojstava monomerne jedinice. Dakle, novi model omogućava proučavanje većih sistema od velike biološke i tehnološke važnosti. Ovakav pristup, u kombinaciji sa proračunima koji se zasnivaju na vremenski zavisnoj DFT metodi, omogućava predviđanja svojstava spregnutih hromofora sa velikom preciznošću.

Rezultati ove doktorske disertacije ukazuju da kvantno hemijske teorijske metode, bazirane na Teoriji funkcionala gustine, pored eksperimentalnih tehnika, imaju bitnu ulogu pri analizi i dizajnu sistema sa željenim svojstvima.

### C. Uporedna analiza rezultata kandidata sa rezultatima iz literature:

Distorzija molekulske strukture kao posledica JT efekta utiče na različita svojstva hemijskih sistema, kao što su npr. stabilnost i reaktivnost. Kako svaka strukturna distorzija vodi poreklo od JT efekta, njegovo ispitivanje vodi razmevanju mnogih hemijskih fenomena. Posledice JT efekta su dalekosežne: utiče na visoku- $T_c$  superprovodljivost, visoku magneto-

otpornost u manganitima, superkonduktivnost u fuleridima, aromatičnost, reaktivnost, kao i mnoge druge osobine.

U svetu se danas nekoliko grupa bavi proučavanjem Jahn-Teller-ovog efekta (dr P. García-Fernández, prof. H. Köppel, prof. W. Domcke, prof. I. B. Bersuker, ...), prvenstveno metodama koje se zasnivaju na talasnoj funkciji. Iako su ove metode vrlo precizne, vremenski su veoma zahtevne, pa se nameće potreba za tačnom, ali manje vremenski zahtevnom metodom, kao što su metode bazirane na Teoriji funkcionala gustine. Postoji verovanje da DFT ne može prikladno opisati degenerisana stanja jer je konvencionalni *Kohn-Sham* DFT zasnovan na jednodeterminantnom pristupu, a opis degenerisanih stanja zahteva primenu više determinanti. Multideterminantni DFT metod, razvijen u grupi prof. C. Daul-a u Friburu, Švajcarska, omogućio je da na jednostavan, brz i pouzdan način analiziramo JT efekat. Osim toga, eksperimentalno odredjivanje JT parametara je teško i često nejednoznačno, pa je razvoj teorijskih metoda koje su brze i tačne od velikog značaja.

Teorijske studije su sprovedene kako bi se rešio problem uticaja većeg broja vibracija, koristeći *Interaction mode* metod razvijen od strane prof. I. B. Bersuker-a, koji kao referentnu strukturu posmatra visoko-simetričnu konformaciju molekula. Nedavno je predložen novi pristup pri analizi uticaja većeg broja vibracija na JT distorziju, pod nazivom IDP model (razvijen od strane prof. C.-W. Schläpfer-a, prof. C. Daul-a i dr M. Zlatara) koji je korišćen u okviru ove doktorske disertacije. Kod IDP modela referentna struktura je distorgovana, nisko-simetrična struktura minimalne energije, koja predstavlja pravi minimum na površini potencijalne energije, pa je vibraciona analiza jednoznačna. Osim toga, u ovoj tezi je pokazano da je moguće korelisati vibracije u minimumu sa vibracijama u višoj simetriji.

Koncept aromatičnosti je postao sastavni deo onoga što se smatra hemijskom intuicijom, omogućavajući lakše razumevanje različitih hemijskih fenomena, kao i racionalizaciju kako eksperimentalnih, tako i teorijskih rezultata, kao prvi korak u predviđanju novih osobina, makar u kvalitativnom smislu. Teorijske studije su usmerene ka traženju porekla aromatičnosti, kao i preciznog definisanja u kvantno-mehaničkom smislu. Pri analizi aromatičnosti koriste se različite metode koje često nisu konzistentne jedna sa drugom. Zbog sve bržeg razvoja nauke o materijalima, ispitivanje uticaja JT efekta na aromatičnost je od sve većeg značaja, posmatrajući npr. magnetizam i strukturu grafena.

Precizan teorijski opis ekscitonske sprege i prenosa energije ekscitacije je svakako izazov, ali je njihovo detaljno razumevanje neophodno za predviđanje toka energije u multi-

hromoformnim sistemima, počevši od fotosintetičkih kompleksa, fotosintetičkih reakcionih centara, konjugovanih polimera, molekulskih kristala, do organskih elektronskih uređaja kao što su organski fotonaponski uređaji i LED tehnologije. Imajući u vidu značaj prenosa energije ekscitacije, razmatranje ovog procesa iz perspektive JT teorije omogućava bolje razumevanje realnih multihromoformnih sistema. Jedna od trenutnih mana u upotrebi organskih solarnih ćelija je niska energetska efikasnost konverzije, koja delimično proizilazi iz neefikasnog prenosa energije ekscitacije. Razvoj integrisanih računarskih i teorijskih pristupa za proučavanje prenosa energije ekscitacije u model- i realnim molekulskim sistemima predstavlja osnov razumevanja energetike i prenosa nanelektrisanja na molekularnom nivou.

#### D. Objavljeni i saopšteni radovi koji čine deo doktorske disertacije:

##### M21 – Radovi objavljeni u vrhunskim časopisima međunarodnog značaja

- García-Fernández, P.; **Andjelković, Lj.**; Zlatar, M.; Gruden-Pavlović, M.; Dreuw, A. *A simple monomer-based model-Hamiltonian approach to combine excitonic coupling and Jahn-Teller theory*. Journal of Chemical Physics **2013**, 139, 174101.
- **Andjelković, Lj.**; Gruden-Pavlović, M.; Daul, C.; Zlatar, M. *The Choice of the Exchange-Correlation Functional for the Determination of the Jahn–Teller Parameters by the Density Functional Theory*. International Journal of Quantum Chemistry **2013**, 113, 859–864.
- Gruden-Pavlović, M.; García-Fernández, P.; **Andjelković, Lj.**; Daul, C.; Zlatar, M. *Treatment of the Multimode Jahn–Teller Problem in Small Aromatic Radicals*. Journal of Physical Chemistry A **2011**, 115, 10801–10813.

##### M22 - Radovi objavljeni u istaknutim časopisima međunarodnog značaja

- **Andjelković, Lj.**; Gruden-Pavlović, M.; Zlatar, M. *Density functional theory study of the multimode Jahn–Teller problem in the open-shell corannulenes and coronenes*. Chemical Physics **2015**, 460, 64-74.
- Perić, M.; **Andjelković, Lj.**; Zlatar, M.; Daul, C.; Gruden-Pavlović, M. *DFT investigation of the influence of Jahn–Teller distortion on the aromaticity in square-planar arsenic and antimony clusters*. Polyhedron **2014**, 80, 69-80.
- Perić, M.; **Andjelković, Lj.**; Zlatar, M.; Nikolić, A. S.; Daul, C.; Gruden-Pavlović, M.; *Spherical aromaticity of Jahn–Teller active fullerene ions*. Monatshefte fur Chemie **2013**, 144, 817-823.

- **Andjelković, Lj.**; Perić, M.; Zlatar, M.; Grubišić, S.; Gruden-Pavlović, M. *Magnetic criteria of aromaticity in a benzene cation and anion: how does the Jahn–Teller effect influence the aromaticity?* Tetrahedron Letters **2012**, 53, 794–799.

#### **M23 - Rad objavljen u časopisu međunarodnog značaja**

- **Andjelković, Lj.**; Perić, M.; Zlatar, M.; Gruden-Pavlović, M. *Nucleus-independent chemical shift profiles along the Intrinsic Distortion Path for Jahn-Teller active molecules. Study on cyclopentadienyl radical and cobaltocene.* Journal of the Serbian Chemical Society **2015**, 80, 877-888.

#### **M34 - Saopštenja sa medjunarodnog skupa štampana u izvodu**

- **Andjelković, Lj.**; Zlatar, M.; Gruden-Pavlović, M. *Treatment of the Multimode Jahn-Teller Problem: From Small Aromatic Organic Radicals to Fullerene Ions*, Poster 1, p. 1, Book of Abstracts, ECOSTBio CM1305 Summer School, Groningen, The Netherlands, July 4 – 11, **2015**.
- Gruden-Pavlović, M.; **Andjelković, Lj.**; Perić ,M.; Zlatar, M. *DFT investigation of aromatic/antiaromatic character of Jahn-Teller active species: case study on arsenic and antimony clusters*, Poster 60, p. 107, Book of Abstacts, 15th Intern. Conf. On Density Functional Theory and its Applications, DFT2013, Durham, UK, September 9 – 13, **2013**.
- **Andjelković, Lj.**; Zlatar, M.; Gruden-Pavlović, M. *The Influence of the Jahn-Teller Effect on the Aromaticity in a Benzene Cation and Anion*, EuAsC2S-12/S5-PP1, e-Book of Abstracts, The 12th Eurasia Conference on Chemical Sciences, Corfu, Greece, April 16 – 21, **2012**.
- Zlatar, M.; Gruden-Pavlović, M.; **Andjelković, Lj.**; Daul, C. *Treatment of Jahn-Teller Effect Using Density Functional Theory*, Poster 119, Book of Abstacts, 14th Intern. Conf. On the Applic. of Density Functional Theory in Chemistry and Physics, DFT11, Athens, Greece, August 29 – September 2, **2011**.

#### **M64 - Saopštenja sa nacionalnih skupova štampana u izvodu**

- Perić, M.; **Andjelković, Lj.**; Zlatar, M.; Gruden-Pavlović, M. *Fullerene cation: The influence of the Jahn-Teller effect on the spherical aromaticity (Fuleren katjon: Uticaj Jahn-Teller-ovog efekta na sfernu aromatičnost)*, TH P1, p. 98, Book of Abstracts, Golden Jubilee Meeting of the Serbian Chemical Society (50. Jubilarno Savetovanje Srpskog Hemijskog Društva), Beograd, Serbia, June 14 – 15, **2012**.
- **Andjelković, Lj.**; Zlatar, M.; Gruden-Pavlović, M. *Multideterminantni DFT Pristup Analize Jahn-Teller-ovog Efekta u Malim Organским Radikalima (Multideterminental DFT Approach in Analysis of Jahn-Teller Effect in Small Organic Radicals)*, TH03-O, Book of

Abstracts, 49. Savetovanje Srpskog Hemijskog Društva (49<sup>th</sup> Meeting of the Serbian Chemical Society), Kragujevac, Serbia, May 13 – 14, 2011.

#### E. Zaključak (obrazloženje naučnog doprinosa doktorske disertacije):

U podnetoj doktorskoj disertaciji kandidat Ljubica Andelković, master hemičar, proučavala je JT efekat i njegove posledice na strukturu i osobine organskih i neorganskih molekula, aromatičnost, ekscitonsku spregu i prenos energije ekscitacije. Detaljna analiza osobina molekula koji podležu JT distorziji putem teorijskih metoda koji pouzdano opisuju, kako JT efekat, tako i posmatrane osobine molekulskih sistema predstavlja put ka boljem razumevanju novih materijala.

Kandidat je u svom radu koristio multideterminantni DFT metod u cilju ispitivanja JT efekta i izračunao JT parametre za ciklobutadienil radikal katjon ( $C_4H_4^{+*}$ ), ciklopentadienil radikal ( $C_5H_5^{\bullet}$ ), benzen katjon ( $C_6H_6^+$ ), benzen anjon ( $C_6H_6^-$ ), tropil radikal ( $C_7H_7^{\bullet}$ ), anjone i katjone koranulena i koronena, male metalne i metaloidne klastere ( $Na_3$ ,  $Ag_3$ ,  $As_4^-$ ,  $Sb_4^-$ ), heksafluorokuprat(II) jon ( $[CuF_6]^{4-}$ ), helatni kompleks mangana ( $[Mn(acac)_3]$ ) i organometalno jedinjenje kobaltocen ( $CoCp_2$ ). Validacija multideterminantnog DFT metoda je izvedena uz sistematsko ispitivanje uticaja različitih DFT funkcionala na izračunavanje JT parametara i poređenje sa dostupnim podacima iz literature. Izvedena je analiza vibracija odgovornih za distorziju molekula primenom IDP modela za kvadratno-planarne klastere arsena i antimona,  $As_4^-$  i  $Sb_4^-$ , ciklopentadienil radikal ( $C_5H_5^{\bullet}$ ), benzen katjon ( $C_6H_6^+$ ), benzen anjon ( $C_6H_6^-$ ), tropil radikal ( $C_7H_7^{\bullet}$ ), kao i anjone i katjone koranulena i koronena,  $C_{20}H_{10}^-$ ,  $C_{20}H_{10}^+$ ,  $C_{24}H_{12}^-$  i  $C_{24}H_{12}^+$ , dajući bolji uvid u JT efekat na mikroskopskom nivou. Takođe je ispitivan uticaj JT efekta: na aromatičnost u benzen katjonu, benzen anjonu, ciklopentadienil radikalu, kobaltocenu, fuleren katjonu i anjonu, klasterima antimona i arsena, kao i na ekscitonsko kuplovanje i prenos energije ekscitacije u benzen dimeru.

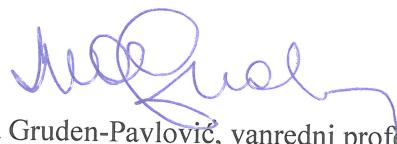
Mišljenja smo da se prikazana istraživanja uklapaju u savremene tokove Opšte i neorganske (teorijske) hemije i da će pružiti značajan fundamentalni doprinos u analizi i razumevanju JT efekta i njegovog uticaja na važne koncepte u prirodnim naukama, kako pri karakterizaciji i interpretaciji strukture, tako i pri određivanju stabilnosti i reaktivnosti mnogih molekula.

Rezultati ove doktorske disertacije su prikazani u 8 naučnih radova (3 rada kategorije M21, 4 rada kategorije M22 i 1 rad kategorije M23) među kojima je kandidat prvi autor na 4 rada i 6 saopštenja na domaćim i međunarodnim skupovima. Stoga, sa zadovoljstvom predlažemo

Nastavno-naučnom veću Hemijskog fakulteta Univerziteta u Beogradu da prihvati podnetu doktorsku disertaciju Ljubice Andđelković, master hemičara i odobri njenu odbranu.

U Beogradu,  
8.10.2015.

Komisija



Dr Maja Gruden-Pavlović, vanredni profesor  
Hemijskog fakulteta Univerziteta u Beogradu, mentor



Dr Matija Zlatar, naučni saradnik  
Centra za hemiju Instituta za Hemiju, Tehnologiju i Metalurgiju  
Univerziteta u Beogradu, mentor



Dr Pablo García-Fernández, naučni saradnik  
Universidad de Cantabria, Departamento CITIMAC, Santander, Cantabria (Spain)



Dr Miloš Milčić, vanredni profesor  
Hemijskog fakulteta Univerziteta u Beogradu