

ПРЕДМЕТНО БРОЈ	26. 01. 2012		
Сл. бр.	70/3	-	-

**НАСТАВНО-НАУЧНОМ ВЕЋУ
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКОГ ФАКУЛТЕТА
У КРАГУЈЕВЦУ**

Предмет: Извештај комисије за оцену и одбрану докторске дисертације **Светлане Јерemiћ.**

На седници Наставно-научног већа Природно-математичког факултета у Крагујевцу, одржаној 28. 12. 2011. године (број 1050/XI-1), одређени смо у комисију за подношење извештаја о урађеној докторској дисертацији под насловом:

**„ПРИЛОГ ПОЗНАВАЊУ ЕЛЕКТРОНСКИХ ОСОБИНА
ПОЛИБЕНЗО-АНЕЛИРАНИХ КОНЈУГОВАНИХ МОЛЕКУЛА“**

кандидата **Светлане Јерemiћ.**

Светлана Јерemiћ је поднела рукопис своје докторске дисертације Наставно-научном већу Природно-математичког факултета на оцену. Ми смо прегледали рукопис, дали своје сугестије након чега је **Светлана Јерemiћ** унела све потребне корекције и на основу тога подносимо Наставно-научном већу Природно-математичког факултета у Крагујевцу следећи

ИЗВЕШТАЈ

1. Значај и допринос докторске дисертације

Полициклични конјуговани молекули (у које спадају и бензеноидни угљоводоници) су у теоријској органској хемији највише проучавана једињења. У

седамдесетим и осамдесетим годинама прошлог века разрађено је неколико теорија које описују и предвиђају физичке и хемијске особине ових једињења. Ове теорије, на овај или онај начин, заснивају се на Кекулеовим структурама, и анализом Кекулеових структура долазе до одговарајућих закључака. Пре неколико година, истраживачка група којом је руководио ментор ове дисертације уочила је да се приликом бензо-анелације неких бензеноидних угљоводоника јављају ефекти који се не могу објаснити Кекулеовим структурама и који противрече ономе што постојеће теорије предвиђају. То је први пута откривено 2004. године у случају бензо-анелацираних перилена, али се то тада схватало више као куриозитет а не као прва манифестација једног новог општеважећег правила. Знатно касније, 2009. године, аналогни ефекти откривени су код деривата аценафтилена и флуорантена, и тада је постало јасно да се ради о једној новој и широко распрострањеној физичко-хемијској појави. Настављајући ова истраживања (која су изложена у недавно одбрањеној докторској дисертацији Јелене Ђурђевић), задатак **Светлане Јермић** је био да на што је могуће широј класи конјугованих једињења испита и провери утицај бензо-анелације. Уколико би се показало да уочене правилности важе код свих полибензо-анелираних конјугованих једињења, тада би се не само установило једно ново универзално хемијско правило (намерно не употребљавамо реч "закон"), него – што сматрамо важнијим – показало би се да неке широко прихваћене хемијске теорије нису сасвим испревне и да се, у најбољем случају, морају ревидирати. Резултати до којих је дошла **Светлана Јермић**, и који су изложени у њеној докторској дисертацији, у великој мери су потврдила наша очекивања.

У уводу дисертације изложени су основи хемијске теорије графова.

У другом поглављу дисертације изложена је теорија цикличне конјугације базирана на енергетским ефектима појединих прстенова. Описани су и други савремени приступи овој проблематици, посебно они засновани на електронском садржају прстенова. Изложено је и раније откривено ПЦП (phenyl-cyclopentadienyl) правило, а формулисано је и њено проширење названо ПОР правило (phenyl-odd-membered-ring), што је један од оригиналних доприноса ове дисертације.

У трећем поглављу се описује теорија којом се објашњава утицај једног прстена на цикличну конјугацију другог прстена. Ова теорија је примењена на неколико класа бензеноидних угљоводоника. Већина резултата овде изложених су оригинални доприноси ове дисертације.

У четвртом поглављу су приказана истраживања усмерена ка квантитативном моделовању утицаја бензо-анелације на цикличну конјугацију у другим прстеновима. Добивени резултати, приказани у бројним табелама и дијаграмима, оригинални су доприноси ове дисертације.

На основу горе наведеног, сматрамо да ова докторска дисертација има велики допринос познавању π -електронских особина конјугованих једињења, нарочито полибензо-анелираних, и да баца ново светло на применљивост раније формулисаних теорија заснованих на Кекулеовим структурама.

2. Оцена оригиналности научног рада

У овој докторској дисертацији испитан је утицај бензо-анелације на π -електронске особине полицикличних конјугованих једињења. На основу истраживања која су урађена, утврђено је:

1. Проширено је ПЦП правило (које се примењује на аценафтилене и флуорантене) и формулисано ПОР правило (које се примењује на једињења са неправим прстеном произвољне величине).
2. Изложена је једна комплетна теорија која описује утицај анелираног прстена на цикличну конјугацију у другим прстеновима. Теорија је примењена на једињења аценафтиленског типа као и бензо-деривате трифенилена и коронена.
3. Разрађен је линеарни модел којим се квантитативно описује утицај различитих начина и различитог броја анелација на цикличну конјугацију. Модел је онда примењен на бензо-анелиране деривате следећих једињења: антрацен, бифенилен, трифенилен, перилен и коронен. Наведени су сви нумерички подаци добијени у овим истраживањима.

Резултати из ове докторске дисертације су верификовани објављивањем у облику девет научних радова у часописима са импакт фактором.

Из свега наведеног се може закључити да је поднета докторска дисертација **Светлане Јерemiћ** резултат оригиналног научног рада кандидата у области Теоријске органске хемије.

3. Преглед остварених резултата кандидата у области Теоријске органске хемије

Светлана Јерemiћ је до сада постигла вредне резултате из области Теоријске органске хемије. Постигнути резултати штампани су облику већег броја научних радова. Подсећамо да се кандидаткиња пре удаје презивала **Милосављевић**.

3.1. Списак научних радова:

1. I. Gutman, D. Vidović, N. Cmiljanović, S. Milosavljević, S. Radenković, Graph energy - A useful molecular structure—descriptor, *Indian Journal of Chemistry* **42A** (2003) 1309-1311. ISSN: 0376-4710; **M23**
2. I. Gutman, N. Cmiljanović, S. Milosavljević, S. Radenković, Effect of non-bonding molecular orbitals on total π -electron energy, *Chemical Physics Letters* **383** (2004) 171-175. ISSN: 0009-2614; **M22**
3. I. Gutman, N. Cmiljanović, S. Milosavljević, S. Radenković, Dependence of total π -electron energy on the number of non-bonding molecular orbitals, *Monatshefte für Chemie* **135** (2004) 765-772. ISSN: 0026-9247; **M22**
4. I. Gutman, D. Stevanović, S. Radenković, S. Milosavljević, N. Cmiljanović, Dependence of total π -electron energy on large number of non-bonding molecular orbitals, *Journal of the Serbian Chemical Society* **69** (2004) 777-782. ISSN: 0352-5139; **M23**
5. I. Gutman, S. Milosavljević, B. Furtula, N. Cmiljanović, Relation between electron and energy contents of hexagons in pericondensed benzenoid hydrocarbons, *Indian Journal of Chemistry* **44A** (2005) 13-17. ISSN: 0376-4710; **M23**
6. I. Gutman, B. Furtula, S. Jeremić, N. Turković, Electron content of rings of fully benzenoid hydrocarbons, *Journal of the Serbian Chemical Society* **70** (2005) 1199-1204. ISSN: 0352-5139; **M23**

7. I. Gutman, S. Jeremić, V. Petrović, Extending the PCP rule, *Indian Journal of Chemistry* **48A** (2009) 658-662. ISSN: 0376-4710; **M23**
8. S. Radenković, W. Linert, I. Gutman, S. Jeremić, Pairwise energy effects of rings in benzo-annelated perylenes, *Indian Journal of Chemistry* **48A** (2009) 1657-1661. ISSN: 0376-4710; **M23**
9. B. Furtula, I. Gutman, S. Jeremić, S. Radenković, Effect of a ring on cyclic conjugation in another ring: Applications to acenaphthylene-type polycyclic conjugated molecules, *Journal of the Serbian Chemical Society* **75** (2010) 83-90. ISSN: 0352-5139; **M23**
10. S. Jeremić, S. Radenković, I. Gutman, Cyclic conjugation in benzo-annelated triphenylenes, *Journal of the Serbian Chemical Society* **75** (2010) 943-950. ISSN: 0352-5139; **M23**
11. S. Marković, J. Đurđević, S. Jeremić, I. Gutman, Diradical character of some fluoranthenes, *Journal of the Serbian Chemical Society* **75** (2010) 1241-1249. ISSN: 0352-5139; **M23**
12. A. T. Balaban, J. Đurđević, I. Gutman, S. Jeremić, S. Radenković, Correlations between local aromaticity indices of bipartite conjugated hydrocarbons, *Journal of Physical Chemistry A* **114** (2010) 5870-5877. ISSN: 1089-5639; **M21**
13. S. Jeremić, S. Radenković, I. Gutman, Cyclic conjugation in benzo-annelated coronenes, *Macedonian Journal of Chemistry and Chemical Engineering* **29** (2010) 63-69. ISSN: 1057-5552; **M23**
14. I. Gutman, S. Marković, S. Jeremić, A case of breakdown of the Kekulé-structure model, *Polycyclic Aromatic Compounds* **30** (2010) 240-246. ISSN: 1040-6638; **M23**
15. A. T. Balaban, I. Gutman, S. Jeremić, J. Đurđević, Effect of benzo-annelation on cyclic conjugation, *Monatshefte für Chemie* **142** (2011) 53-57. ISSN: 0026-9247; **M22**
16. S. Marković, J. Đurđević, S. Jeremić, I. Gutman, Triplet fluoranthenes: Aromaticity versus unpaired electrons, *Journal of Molecular Modeling* **17** (2011) 805-810. ISSN: 1610-2940; **M21**

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

Обзиром на задатке који су предвиђени при предлагању теме ове докторске дисертације сматрамо да су сви предвиђени задаци у потпуности остварени.

5. Научни резултати поднете докторске дисертације

Научни резултати поднете докторске дисертације публиковани су у облику 9 (девет) научних радова:

1. I. Gutman, S. Jeremić, V. Petrović, Extending the PCP rule, *Indian Journal of Chemistry* **48A** (2009) 658-662. ISSN: 0376-4710; **M23**
2. S. Radenković, W. Linert, I. Gutman, S. Jeremić, Pairwise energy effects of rings in benzo-annelated perylenes, *Indian Journal of Chemistry* **48A** (2009) 1657-1661. ISSN: 0376-4710; **M23**
3. B. Furtula, I. Gutman, S. Jeremić, S. Radenković, Effect of a ring on cyclic conjugation in another ring: Applications to acenaphthylene-type polycyclic conjugated molecules, *Journal of the Serbian Chemical Society* **75** (2010) 83-90. ISSN: 0352-5139; **M23**
4. S. Jeremić, S. Radenković, I. Gutman, Cyclic conjugation in benzo-annelated triphenylenes, *Journal of the Serbian Chemical Society* **75** (2010) 943-950. ISSN: 0352-5139; **M23**
5. S. Marković, J. Đurđević, S. Jeremić, I. Gutman, Diradical character of some fluoranthenes, *Journal of the Serbian Chemical Society* **75** (2010) 1241-1249. ISSN: 0352-5139; **M23**
6. A. T. Balaban, J. Đurđević, I. Gutman, S. Jeremić, S. Radenković, Correlations between local aromaticity indices of bipartite conjugated hydrocarbons, *Journal of Physical Chemistry A* **114** (2010) 5870-5877. ISSN: 1089-5639; **M21**
7. S. Jeremić, S. Radenković, I. Gutman, Cyclic conjugation in benzo-annelated coronenes, *Macedonian Journal of Chemistry and Chemical Engineering* **29** (2010) 63-69. ISSN: 1057-5552; **M23**
8. I. Gutman, S. Marković, S. Jeremić, A case of breakdown of the Kekulé-structure model, *Polycyclic Aromatic Compounds* **30** (2010) 240-246. ISSN: 1040-6638; **M23**
9. A. T. Balaban, I. Gutman, S. Jeremić, J. Đurđević, Effect of benzo-annelation on cyclic conjugation, *Monatshefte für Chemie* **142** (2011) 53-57. ISSN: 0026-9247; **M22**

6. Примењивост резултата у теорији и пракси

Резултати постигнути у оквиру ове докторске дисертације представљају резултат оригиналног научног рада кандидата у области Теоријске органске хемије. Сматрамо да ова докторска дисертација има велики допринос, и са теоријског и са практичног становишта, познавању хемије полицикличних конјугованих једињења.

7. Примењивост и корисност резултата у теорији и пракси

Постигнути резултати ове докторске дисертације представљају, пре свега велики научни допринос познавању хемије полицикличних конјугованих једињења, али истовремено указују на могућност даљег рада у овој научној области.

8. Начин презентирања резултата научној јавности

Научни допринос као резултати ове докторске дисертације су верификовани објављивањем у облику девет научних радова у часописима са импакт фактором.

Докторска дисертација написана је на 124 стране и садржи 57 слика, 27 табела и 46 литературних података. Дисертација је подељена на **Увод** (5-17), **Појам цикличне конјугације** (18-48), **Ефекат прстена на цикличну конјугацију другог прстена** (49-76), **Квантитативни модели за утицај бензоанелације** (77-114), **Закључак** (115-117), **Summary** (118-120) и **Литературу** (121-124).

Такође, 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.

З А К Л Ј У Ч А К

Поднети рукопис докторске дисертације **Светлане Јеремић** под насловом
**„ПРИЛОГ ПОЗНАВАЊУ ЕЛЕКТРОНСКИХ ОСОБИНА
ПОЛИБЕЗО-АНЕЛИРАНИХ КОНЈУГОВАНИХ МОЛЕКУЛА“**

представља оригинални научни рад и значајна је са научне тачке гледишта. Резултати ове докторске дисертације су довели до нових и значајних сазнања о особинама полицикличних конјугованих једињења. Резултати из ове докторске дисертације су верификовани објављивањем у облику девет научних радова у часописима са импакт фактором.

Сматрамо да су испуњени сви услови за прихватање наведене докторске дисертације као оригиналног научног рада. Стога предлажемо Наставно-научном већу Природно-математичког факултета и Стручном већу за природно-математичке науке Универзитета у Крагујевцу да кандидату **Светлани Јеремић** одобри јавну одбрану *докторске дисертације* под наведеним насловом.

У Крагујевцу,
12. 01. 2012. год.

К о м и с и ј а

Ivan Gutman

1. Др Иван Гутман, (ментор), редовни професор Природно-математички факултет, Крагујевац
ужа научна област: Физичка хемија

Jelena Radic-Peric

2. Др Јелена Радић-Перић, редовни професор Факултет за физичку хемију, Београд
ужа научна област: Атомистика

S. Marković

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