

# УНИВЕРЗИТЕТ У НОВОМ САДУ

## ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ

### ИЗВЕШТАЈ О ОЦЕНИ ДОКТОРСKE ДИСЕРТАЦИЈЕ

<b>I ПОДАЦИ О КОМИСИЈИ</b>
<ol style="list-style-type: none"><li>1. Датум и орган који је именовao комисију Наставно-научно веће Природно-математичког факултета у Новом Саду на 39. седници одржаној 17. септембра 2015.</li><li>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</li></ol>
<b>II ПОДАЦИ О КАНДИДАТУ</b>
<ol style="list-style-type: none"><li>1. Име, име једног родитеља, презиме: Бојана, Милан, Француски</li><li>2. Датум рођења, општина, држава: 14.01.1979. Београд, Република Србија</li><li>3. Назив факултета, назив студијског програма дипломских академских студија – мастер и стечени стручни назив</li><li>4. Година уписа на докторске студије и назив студијског програма докторских студија</li><li>5. 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.</li><li>6. Научна област из које је стечено академско звање магистра наука: Хемија</li></ol>
<b>III НАСЛОВ ДОКТОРСKE ДИСЕРТАЦИЈЕ:</b>
<b>Електростатичка својства атома сумпора у дериватима тиосемикарбазида</b>
<b>IV ПРЕГЛЕД ДОКТОРСKE ДИСЕРТАЦИЈЕ:</b>
Докторска дисертација под насловом <b>Електростатичка својства атома сумпора у дериватима тиосемикарбазида</b> 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.

<b>IX КОНАЧНА ОЦЕНА ДОКТОРСKE ДИСЕРТАЦИЈЕ:</b>	
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.
<b>X ПРЕДЛОГ:</b>	
На основу укупне оцене дисертације, комисија предлаже да се докторска дисертација под насловом " <b>Електростатичка својства атома сумпора у дериватима тиосемикарбазида</b> " прихвати, а кандидату <b>мр Бојани Француски</b> 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