

## НАСТАВНО-НАУЧНОМ ВЕЋУ ФАКУЛТЕТА ЗА ФИЗИЧКУ ХЕМИЈУ

На V редовној седници Наставно-научног већа Факултета за физичку хемију Универзитета у Београду, одржаној 08.02.2018. године, одређени смо за чланове Комисије ради спровођења поступка за стицање научног звања **научни сарадник др Милана Миловановића**.

На основу приложене и прикупљене документације о кандидату, биографских података и прегледа научно-истраживачког рада, а у складу са Законом о научно-истраживачкој делатности и Статутом Факултета за физичку хемију подносимо следећи:

### ИЗВЕШТАЈ

#### **А. Општи подаци о кандидату**

Кандидат др Милан Миловановић је рођен 09.10.1987. године у Рачи, где је завршио основну школу и Другу крагујевачку гимназију.

Основне студије на Факултету за физичку хемију, Универзитета у Београду, уписао је 2006. године. Дипломирао је 2010. године са просечном оценом 9,92. Назив теме дипломског рада је био: „Структура и енергије растварања  $\text{H}_2\text{CO}_3$ ,  $\text{HCO}_3^-$  и  $\text{CO}_3^{2-}$  применом *ab initio* метода”.

Од 2010. до 2011. године похађао је мастер студије на Факултету за физичку хемију и дипломирао са просечном оценом 9,80. Назив теме мастер рада је био: “*Ab initio* проучавање вибронских нивоа основног електронског стања  $\text{C}_2\text{Sb}$ ”.

Докторску дисертацију под називом „Теоријска истраживања геометрије, стабилности и хемијских веза у малим кластерима литијума са халогенима“ одбранио је 28.12.2015. године.

Након завршетка основних студија добио је повељу за најбољег студента генерације 2009/2010 Факултета за физичку хемију, награду фонда Сестре Булајић за најбољи одбрањен дипломски рад на Факултету за физичку хемију у 2010. години, и годишњу награду (за 2011. годину) Српског хемијског друштва за изузетан успех у току студија.

Од јануара 2012. запослен је као истраживач на пројекту бр. 172040, „Структура и динамика молекулских система у основним и побуђеним електронским стањима”, чији је руководилац био академик Миљенко Перић, а затим ванр. проф. др Михајло Етински. Од 2014. је асистент на Факултету за физичку хемију, где држи вежбе из предмета Квантна хемија, Атомистика, Увод у структуру материје и Физичка хемија

флуида. Кандидат је од 2013. године учесник на међународном пројекту COST акција CM1401 “Our Astro-Chemical History“.

Милан Миловановић је до сада објавио 10 радова у међународним часописима, затим 9 саопштења на међународним скуповима, као и 2 саопштења на скуповима националног значаја. Област његовог научног рада су квантна хемија и астрохемија.

## **Б. Библиографија**

### **1. Магистарске и докторске тезе**

#### **1.1. Одбрањена докторска дисертација (M70)**

**\*1 × 6 = 6**

„Теоријска истраживања геометрије, стабилности и хемијских веза у малим кластерима литијума са халогенима“ Факултет за физичку хемију, Универзитет у Београду, Београд, 2015.

### **2. Научни радови објављени у научним часописима међународног значаја**

#### **2.1. Радови у врхунским међународним часописима (M21)**

**\*3 × 8 = 24**

2.1.1. M. Milovanović, S. Veličković, F. Veljković, S. Jerosimić, Structure and stability of small lithium-chloride  $\text{Li}_n\text{Cl}_m^{(0,1+)}$  ( $n \geq m$ ,  $n = 1-6$ ,  $m = 1-3$ ) clusters. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 19, 30481–30497 (2017).

2.1.2. M. Perić, S. Jerosimić, M. Mitić, M. Milovanović, R. Ranković, Underlying theory of a model for the Renner–Teller effect in tetra-atomic molecules:  $X^2\Pi_u$  electronic state of  $\text{C}_2\text{H}_2^+$ , *J. Chem. Phys.* 142, 174306-1–174306-14 (2015).

2.1.3. M. Z. Milovanović, S. V. Jerosimić, Theoretical investigation of geometry and stability of small lithium-iodide  $\text{Li}_n\text{I}$  ( $n = 2-6$ ) clusters. *Int. J. Quantum Chem.* 114, 192–208 (2014).

#### **2.2. Радови у истакнутим међународним часописима (M22)**

**\*5 × 5 = 25**

2.2.1. M. Mitić, M. Milovanović, R. Ranković, S. Jerosimić, M. Perić, Topological study of nonadiabatic effects in  $\Pi$  electronic states of tetra-atomic molecules, *Mol. Phys.* Accepted for publication, (2018) DOI: 10.1080/00268976.2018.1445876.

2.2.2. S. V. Jerosimić and M. Z. Milovanović, Iron Monocyanide (FeCN): Spin-orbit and Vibronic Interactions in Low-lying Electronic States, *J. Mol. Spectrosc.*, (2018). DOI: 10.1016/j.jms.2018.01.005

2.2.3. M. Mitić, R. Ranković, M. Milovanović, S. Jerosimić, M. Perić, Underlying theory of a model for the Renner–Teller effect in any-atomic linear molecules on example of the  $X^2\Pi_u$  electronic state of  $C_5^-$ , *Chem. Phys.* 464, 55–68. (2016).

2.2.4. J. Đustebek, M. Milovanović, S. Jerosimić, M. Veljković, S. Veličković, Theoretical and experimental study of the non-stoichiometric  $Li_nI$  ( $n=3$  and 5) clusters. *Chem. Phys. Lett.* 556, 380–385 (2013).

2.2.5. M. Z. Milovanović, S. V. Jerosimić, An ab initio study of antimony dicarbide ( $C_2Sb$ ). *Chem. Phys. Lett.* 565, 28–34 (2013).

### **2.3. Радови у међународним часописима (M23)**

**\*2 × 3 = 6**

2.3.1. M. Mitić, M. Milovanović, R. Ranković, S. Jerosimić and M. Perić, Variational calculation of the vibronic spectrum in the  $X^2\Pi_u$  electronic state of  $C_6^-$ , *J. Serbian Chem. Soc.*, (2018). DOI: 10.2298/JSC171129001M

2.3.2. M. Radisavljević, T. Kamčeva, I. Vukićević, M. Nišavić, M. Milovanović and M. Petković, Sensitivity and accuracy of organic matrix-assisted laser desorption and ionization mass spectrometry of  $FeCl_3$  is higher than in matrix-free approach. *Eur. J. Mass Spectrom.* 19, 77–89 (2013).

### **3. Зборници са међународних научних скупова**

#### **3.1. Саопштења са међународних скупова штампана у целини (M33)**

**\*2 × 1 = 2**

3.1.1. F. Veljković, M. Mitić, M. Milovanović, S. Jerosimić, D. Drakulić and S. Veličković, Theoretical and experimental evaluation of  $K_2Br^+$  and  $K_3Br^+$  clusters' ionization energies, 13<sup>th</sup> International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry, Physical Chemistry 2016, Ed. Ž. Čupić and S. Anić, Publisher: Society of Physical Chemists of Serbia, Belgrade, Serbia, September 26-30, 2016, p.107-110.

3.1.2. M. Milovanović, The structure of hyperlithiated  $Li_5I$  molecule, 11th International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry, Physical Chemistry 2012, Contributed papers & abstracts of poster contributions, Ed. S. Anić and Ž. Čupić, Publisher: Society of Physical Chemists of Serbia, Belgrade, Serbia, September 24-28, 2012, p.106.

#### **3.2. Саопштења са међународних скупова штампана у изводу (M34)**

**\*7 × 0,5 = 3,5**

3.2.1. S. Jerosimić, M. Mitić, R. Ranković, M. Milovanović, M. Perić, The low-lying vibronic spectrum in the  $X^2\Pi_u$  state of the  $C_5^-$  ion computed variationally, The Astrochemical Week, CM1401, Book of abstracts, Faro, Portugal, January 16-20, 2017. p 40.

3.2.2. S. Jerosimić, M. Milovanović, Iron monocyanoide (FeCN): an ab initio investigation of vibronic and spin-orbit effects in low-lying electronic states, Our astrochemical history CM1401, Book of abstracts, First general meeting in Prague, Czech Republic, May 25-29, 2015.

3.2.3. M. Z. Milovanović, S. V. Jerosimić, Geometries, stability and bonding in small lithium-chloride clusters –  $\text{Li}_n\text{Cl}^{(0,+1)}$  ( $n=1-6$ ), 50th Symposium on Theoretical Chemistry 2014, Quantum Chemistry and Chemical Dynamics, Vienna, Austria, September 14-18, Vienna: University of Vienna, 2014.

3.2.4. M. Milovanović, S. Jerosimić, Geometries and stability of neutral and cationic hyperlithiated clusters -  $\text{Li}_n\text{I}^{(0,+1)}$  ( $n=1-6$ ), 8th International Conference of the Chemical Societies of the South-East European Countries: Chemistry for the new horizon, Book of Abstracts, Ed. Sofija Sovilj and Aleksandar Dekanski, Publisher: Serbian Chemical Society, Belgrade, Serbia, June 27-29, 2013. p.106.

3.2.5. M. Milovanović, S. Jerosimić, An *ab initio* study of antimony dicarbide ( $\text{C}_2\text{Sb}$ ), 8th International Conference of the Chemical Societies of the South-East European Countries: Chemistry for the new horizon, Book of Abstracts, Ed. Sofija Sovilj and Aleksandar Dekanski, Publisher: Serbian Chemical Society, Belgrade, Serbia, June 27-29, 2013, p.105.

3.2.6. S. Jerosimić, M. Milovanović, Structural isomers of dicyanoacetylene ions: a theoretical study, 8th International Conference of the Chemical Societies of the South-East European Countries: Chemistry for the new horizon, Book of Abstracts, Ed. Sofija Sovilj and Aleksandar Dekanski, Publisher: Serbian Chemical Society, Belgrade, Serbia, June 27-29, 2013, p.116.

3.2.7. S. Jerosimić, Lj. Stojanović, M. Milovanović, M. Perić, Ab initio study of the ground and low-lying excited electronic states of  $\text{C}_2\text{P}$ ,  $\text{C}_2\text{As}$ , and  $\text{C}_2\text{Sb}$ , COST Action CM0805 “The Chemical Cosmos”, Final Annual Conference, Windsor, UK, April 2-5, 2013, p.56.

#### **4. Предавања по позиву на скуповима националног значаја**

##### **4.1. Saopštenja sa skupa nacionalnog značaja štampano u izvodu (M64)**

**\*2 × 0,2 = 0,4**

4.1.1. M. Mitić, M. Milovanović, M. Perić, “Theoretical study of vibronic and spin-orbit coupling in the  $X^2\Pi_u$  electronic state of copper dicarbonyl complex  $\text{Cu}(\text{CO})_2$ ”, Fourth Conference of Young Chemist of Serbia, Belgrade, Serbia, November 5, 2016, Book of Abstracts, p. 98

4.1.2. M. Milovanović, S. Jerosimić, “An ab initio calculation of the vibronic energy levels in the  $X^2\Pi$  electronic state of  $\text{C}_2\text{Sb}$ ”, 2<sup>st</sup> National conference on electronic, atomic, molecular and photonic physics, CEAMPP 2011, Contributed papers & abstracts of invited

lectures, Ed. A.R. Milosavljević, S. Dujko, B.P. Marinković, Publisher: Institute of Physics, Belgrade, Serbia, June 21-25, 2011, p.119.

**На основу критеријума за процену научне компетентности кандидата у групацији природно-математичких наука, кандидат је остварио следеће квантитативно изражене резултате:**

**Укупно:  $M = 66,9$  (за научног сарадника потребно 16)**

$$M_{10}+M_{20}+M_{31}+M_{32}+M_{33}+M_{41}+M_{42} = 3 \times 8 + 5 \times 5 + 2 \times 3 + 2 \times 1 = 57$$

**(потребно 10)**

$$M_{11}+M_{12}+M_{21}+M_{22}+M_{23} = 3 \times 8 + 5 \times 5 + 2 \times 3 = 55$$

**(потребно 6).**

## **В. Квалитативна оцена научног доприноса**

### **1. Показатељи успеха у научном раду**

Публикације приказане под Б. квантитативно вишеструко превазилазе минималне критеријуме потребне за избор у звање научни сарадник и показују да се кандидат успешно бавио научно-истраживачким радом у протеклом периоду. Посебно се могу истаћи три рада у врхунским међународним часописима, два на тему литијум–халогених кластера и један на тему моделовања вибронских спектра у линеарним молекулима.

Кандидат је члан Српског хемијског друштва. Урадио је рецензију рада за часопис *Inorganic Chemistry*.

### **2. Ангажованост у развоју услова за научни рад, образовању и формирању научних кадрова**

Запослен је као асистент на Факултету за физичку хемију, где држи вежбе студентима из предмета Квантна хемија, Атомистика, Увод у структуру материје и Физичка хемија флуида.

Кандидат је дао допринос при реализацији два дипломска рада урађена на Факултету за физичку хемију. Допринос популаризацији науке и ширењу научног мишљења кандидат пружа као редовни учесник манифестација „Фестивал науке“, „Ноћ истраживача“, као и „Наука око нас“ коју организује Факултет за физичку хемију.

### **3. Организација научног рада**

Кандидат је од јануара 2012. запослен као истраживач на пројекту бр. 172040, „Структура и динамика молекулских система у основним и побуђеним електронским стањима“, чији је руководилац ванр. проф. др Михајло Етински. Од 2013. године учесник је на међународном пројекту COST акције CM1401 “Our Astro-Chemical History“.

У периоду од 28. фебруара до 12. марта 2017. године, др Миловановић је био на стручном усавршавању на Хемијском департману, Универзитета Коимбра у Португалу. Такође, ради стручног усавршавања, кандидат је током јануара 2018. године боравио на Институту за јонску и примењену физику Универзитета у Инзбруку, у Аустрији, где се непосредно могао упознати са извођењем екперимената на ниским температурама и упознати са начином рада већих истраживачких група.

#### **4. Квалитет научних резултата**

Научно-истраживачка активност др Милана Миловановића је била усмерена у два правца: један је истраживање малих молекула, радикала и јона који су идентификовани у интерстеларном простору, с циљем предвиђања и асигнације већ постојећих спектара; други правац је испитивање геометријске и електронске структуре, механизма раста и стабилности кластера алкалних метала (литијума и калијума) са халогеним елементима (хлором, бромом и јодом).

Истраживање др Милана Миловановића која се односе на врсте детектоване у интерстеларном простору су од значаја за астрохемију. Она обухватају одређивање структуре, побуђених електронских стања, моделовање инфрацрвених спектара, рачунање вибронских нивоа у просторно и спинско дегенерисаним електронским стањима која испољавају Ренер–Телеров ефекат, предвиђање спин-орбитне интеракције, одређивање момената прелаза и могућностима интерсистемских прелаза. Ови теоријски подаци, заједно са астрономским и екперименталним подацима, дају допринос развоју модела, који описују стварање и развој звезда од раног Космоса до садашњости.

Хетерогени кластери алкалних метала и халогена могу се користити за синтезу нових материјала. Предуслов за њихову употребу је познавање својстава. С тим циљем кандидат је, у сарадњи са екперименталном групом из Института Винча, где су први пут синтетисани овакви хетерогени кластери, испитивао њихову геометрију, хемијске везе и стабилност, помоћу квантно-хемијских метода.

Кандидат Милан Миловановић је публиковао 10 радова у међународним часописима (од тога 3 рада у врхунским међународним часописима M21, 5 радова у истакнутим међународним часописима M22, и 2 рада у међународним часописима M23), 9 саопштења на међународним скуповима, као и 2 саопштења на скуповима националног значаја. Кандидат је учествовао у свим фазама израде радова, од осмишљавања истраживања, преко писања програма и извођења рачуна, израде слика и табела, до писања текста. Кандидат је први аутор на три рада у међународним часописима. Према индексној бази Scopus резултати су цитирани у научној литератури 13 пута, од чега 9 пута од стране других аутора.

#### **Г. Кратак приказ радова**

У Астрохемији, при проучавању састава интерстеларног простора и реакција у њему, неопходан је мултидисциплинаран приступ– за добијање комплетне слике, резултати добијени у астрономским опсерваторијама, екперименталним

лабораторијама и теоријским путем се комбинују и допуњују. С тим циљем испитивани су мали молекули од значаја за астрохемију:  $\text{FeCN}$ ,  $\text{C}_2\text{H}_2^+$ ,  $\text{C}_5^-$ ,  $\text{C}_6^-$ .

У раду 2.2.2. је проучаван молекул  $\text{FeCN}$ , први молекул детектован у интерстеларном простору који садржи атом гвожђа. Приказани су вибронски нивои и спин-орбитне константе у нискоенергетским квартетним и секстетним  $\Delta$  стањима. Показано је, да услед малог цепања потенцијалне енергије савијања, за најнижа  $^{4,6}\Delta$  стања, вибронско спрезање је занемарљиво и не утиче на енергетске нивое, док је утицај анхармоничности од суштинског значаја. Међутим, фина спин-орбитна структура има доминантан утицај на спектре код молекула  $\text{FeCN}$ .

Рад 2.2.5. представља детаљно *ab initio* испитивање молекула  $\text{C}_2\text{Sb}$  помоћу мултиреферентних метода и методе спрегнутих кластера, укључујући релативистичке ефекте. Пронађено је да је молекул  $\text{C}_2\text{Sb}$  квази-линеаран у основном  $^2\text{A}$  стању са веома малом баријером ка линеарности. Урађена је анализа молекулских орбитала, спин-орбитне спреге, дисоцијационих енергија и нисколежећих побуђених електронских стања.

У радовима 2.1.2, 2.2.3. и 2.3.1. проучаван је Ренер-Телеров ефекат у молекулима са више од три језгра – и то редом четвороатомском ( $\text{C}_2\text{H}_2^+$ ), петоатомском ( $\text{C}_5^-$ ) и шестоатомском ( $\text{C}_6^-$ ) молекулу са линеарном равнотежном геометријом у просторно и спински дегенерисаним електронским стањима. Развијен је поступак и написан програм за варијационо рачунање вибронског спектра у овим молекулима, који је могуће проширити на веће линеарне системе. У раду 2.1.2. доказана је веродостојност једноставног модела Ренер-Телеровог ефекта, поређењем са *ab initio* израчунатим електронским енергетским површима и неадијабатским елементима за  $X^2\Pi_u$  стање  $\text{C}_2\text{H}_2^+$ . Заправо, доказано је да схема дијабатизације, коришћена у овом моделу, може да се изведе, без компјутационо захтевних рачуна неадијабатских матричних елемената за велики број геометрија молекула. Показано је да је само четири параметра (уз спин-орбитну константу), која се могу добити из *ab initio* рачуна изведених на пет одговарајућих (планарних) молекулских геометрија, довољно да се формира матрица Хамилтонијана, чија дијагонализација даје комплетан нискоенергетски вибронски спектар  $\text{C}_2\text{H}_2^+$ . У раду 2.2.2. је представљена теорија која стоји иза већ поменутог модела Ренер-Телеровог ефекта, уз посебну пажњу усмерену на систематски пресек потенцијалних површи услед савијајућих вибрација, и њихов ефекат на неадијабатске матричне елементе. Као пример узет је молекул  $\text{C}_5^-$  са  $X^2\Pi_u$  основним стањем. У раду 2.2.1. је испитивана тополошка структура адијабатских површи потенцијалне енергије и неадијабатских елемената у оквиру једноставног модела Ренер-Телеровог ефекта, на примеру четвороатомског молекула  $\text{C}_2\text{H}_2^+$ .

Кластери су мале стабилне или метастабилне групе атома, које показују збирна физичка својства различита од атома који улазе у њихов састав. По особинама и величини кластери се налазе између молекула и чврстих материјала, што пружа могућност њихове употребе као нових материјала са посебним својствима.

У радовима 2.1.1, 2.1.3. и 2.2.4. су помоћу квантно-хемијских метода испитивана основна електронска стања малих хетерогених кластера литијума са јодом и хлором, њихова геометрија, хемијска веза и стабилност.

У раду 2.2.4. су представљени експериментални подаци који се односе на кластере  $\text{Li}_n^{(0,+1)}$  ( $n = 2-6$ ) и теоријски подаци за  $\text{Li}_n^{(0,+1)}$  ( $n = 3$  и  $5$ ). Рад 2.1.3. обухвата систематско теоријско истраживање структуре и стабилности неутралних и позитивно наелектрисаних  $\text{Li}_n^{(0,+1)}$  ( $n=2-6$ ) кластера. Геометријски изомери су одређени коришћењем стохастичке методе претраге, и затим оптимизацијом помоћу методе функционала густине. За све изомере израчунате су енергије помоћу методе спрегнутих кластера. Ове енергије су искоришћене за израчунавање релативних енергија изомера, енергије везивања по атому, адијабатских и вертикалних енергија јонизације, и енергија дисоцијације. Показано је да ове врсте имају мању енергију јонизације од алкалних метала, тј. да се могу сврстати у „супералкале”. Уз то, литијумски кластери допирани јодом имају већу стабилност у односу на чисто литијумске кластере. На основу анализе природних везивних орбитала, закључено је да делокализација електрона између три и више атома доводи до стабилизације. Хетерогени кластери се састоје од позитивно наелектрисаног литијумског „кавеза”, и анјона јода; при јонизацији електрон одлази из литијумског кавеза.

У раду 2.1.1. је представљено теоријско-експериментално истраживање кластера литијума са хлором,  $\text{Li}_n\text{Cl}_m^{(0,+1)}$  ( $n = 2-6$ ,  $m = 1-3$ ,  $n \geq m$ ). Ови кластери су први пут детектовани, дати су експериментални услови за њихову синтезу и испитана је њихова стабилност. Теоријски су предвиђени геометријски изомери, дати механизми раста кластера, енергије везивања по атому, адијабатске и вертикалне енергија јонизације, енергије дисоцијације, хемијске тврдоће и хемијски потенцијали. Стабилност кластера допираних хлором је већа од чистих литијумских кластера, међутим стабилност достиже максимум када су врсте састављене од истог броја Li и Cl атома. Показано је да се експериментално одређена стабилност најбоље теоријски описује преко енергија дисоцијације.  $\text{Li}_n\text{Cl}_m$  кластери су подељени у две групе: а) хиперлитијумски кластери (код којих постоји бар један електрон у вишку, који потиче од атома литијума, а који није предат атому хлора; они се састоје од литијумског кавеза и  $m$  атома хлора) и б) јонски кластери где су сви валентни електрони локализовани на атому хлора, па се може рећи да је формирана јонска веза.



## **Оцена комисије о научном доприносу кандидата са образложењем**

На основу приложене и прикупљене документације о кандидату, биографских података и прегледа научно-истраживачког рада, Комисија закључује да кандидат Милан Миловановић, доктор физичкохемијских наука, запослен као асистент на Факултету за физичку хемију, поред одбрањене докторске дисертације, има: 10 радова у међународним часописима (од тога 3 рада у врхунским међународним часописима M21, 5 радова у истакнутим међународним часописима M22, и 2 рада у међународним часописима M23), 9 саопштења на међународним скуповима, као и 2 саопштења на скуповима националног значаја. Према индексној бази Scopus резултати су цитирани у научној литератури 13 пута, од чега 9 пута од стране других аутора.

Према свему наведеном може се закључити да је др Милан Миловановић у области физичкохемијских наука остварио резултате, који га у складу са Правилником о поступку и начину вредновања и квантитативном исказивању научно-истраживачких резултата истраживача Националног савета за научни и технолошки развој Републике Србије, квалификују за избор у звање научни сарадник.

Комисија стога сматра да су испуњени сви услови на основу којих Наставно-научно веће Факултета за физичку хемију Универзитета у Београду може да утврди предлог да др **Милан Миловановић** буде изабран у звање **научни сарадник**.

У Београду, 28.02.2018.

**КОМИСИЈА:**

---

Др Миљенко Перић, професор емеритус, редовни члан САНУ  
Универзитет у Београду – Факултет за физичку хемију

---

Др Станка Јеросимић, ванредни професор  
Универзитет у Београду – Факултет за физичку хемију

---

Др Милена Петковић, ванредни професор  
Универзитет у Београду – Факултет за физичку хемију

---

Др Снежана Зарић, редовни професор  
Универзитет у Београду – Хемијски факултет