

УНИВЕРЗИТЕТ У БЕОГРАДУ
ФАКУЛТЕТ ЗА ФИЗИЧКУ ХЕМИЈУ
ИЗБОРНОМ ВЕЋУ

На II редовној седници Изборног већа Факултета за физичку хемију Универзитета у Београду одржаној 09.11.2017. именовани смо за чланове Комисије за припрему извештаја о пријављеним кандидатима за избор у звање и на радно место за ужу научну област **Физичка хемија – Квантна хемија** а за предмете **Атомистика** и **Увод у структуру материје**, на Факултету за физичку хемију Универзитета у Београду.

На конкурс објављеном у листу „Послови” број 752, дана 22.11.2017. године пријавио се један кандидат, др Радомир Ранковић, доцент на Факултету за физичку хемију Универзитета у Београду. На основу приложене и прикупљене документације подносимо следећи

ИЗВЕШТАЈ

А. Биографски подаци

Радомир Ранковић је рођен 08.08.1979. у Београду где је завршио основну школу и гимназију са одличним успехом. Факултет за физичку хемију је уписао школске 1997/1998, а дипломирао у јуну 2003. године са просечном оценом 9,00 (девет и 00/100) и оценом 10 (десет) на дипломском испиту. Тема дипломског рада је била из квантне хемије – „Квантномеханичко третирање ротација крутих молекула”. Докторирао је у фебруару 2010. године, са темом „Теоријско проучавање вибронеке и спин-орбитне спреге у линеарним шестоатомским молекулима”. Докторат је био из уже научне области Физичка хемија – Квантна хемија. Аутор је сталног помоћног уџбеника за предмет Атомистика. Аутор је **9** радова као и **4** саопштења. Цитиран је укупно **30** пута, од тога **12** пута без аутоцитата.

Б. Дисертације

1. Докторска дисертација (M71=6)

Радомир Ранковић, „Теоријско проучавање вибронеке и спин-орбитне спреге у линеарним шестоатомским молекулима”, Факултет за физичку хемију, Универзитет у Београду, Београд, 2010.

В. Наставна делатност

Током скоро петнаестогодишњег рада на Факултету за физичку хемију др Радомир Ранковић је водио вежбе из великог броја предмета: Атомистика, Квантна хемија, Квантна хемија и молекулске структуре, Увод у структуру материје, Молекулска спектрохемија, Општи курс Физичке хемије, Физичка хемија за географе – смер екологија, Увод у лабораторијски рад, Примена рачунара у физичкој хемији, Хемијска термодинамика. На предметима Атомистика, Увод у структуру материје и Квантна хемија био је више година једини асистент. Вежбама, и уопште раду са студентима кандидат приступа савесно и марљиво, унапређујући постојеће вежбе или уводећи нове (нпр. експериментална вежба: „Франк-Херцови огледи, интеракција електрона са атомима неона”). Кандидат има овакав приступ и када се ради о рачунским или теоријским вежбама какве су нпр. на предметима Квантна хемија и Увод у структуру материје.

Временски период рада на Факултету, поклопио се са увођењем Болоњског процеса у наставу тако да је др Радомир Ранковић активно учествовао са својим професорима, а то се нарочито односи на предмете Атомистика, Увод у структуру материје и Квантна хемија, у прилагођавању наставе новом методу. То је захтевало и низ промена у организацији вежби које су се огледале и у промени броја и садржаја колоквијума, увођење тестова као и увођење бодова у систем оцењивања а после и анализу примењених нових поступака, њихово кориговање итд.

Од избора у звање доцента, кандидат је држао предавања из редовних курсева Атомистика и Увод у структуру материје (од 2014). На почетку овог периода држао је и вежбе из оба ова предмета. Поменута два курса су важна јер упознају све студенте Физичке хемије са појмовима који ће бити коришћени на курсевима које ће касније слушати. То је захтевало велики ангажман кандидата. Поменимо, пре свега, да је др Радомир Ранковић аутор сталног помоћног уџбеника: „Атомистика – задаци и вежбе”, објављеног 2010. (друго издање 2016), који уз већ постојећи уџбеник проф. Слободана Мацуре и проф. Јелене Радић-Перић покрива комплетно градиво предмета Атомистика. Апаратура вежбе за фотоелектрични ефекат из Атомистике је значајно унапређена. На предавањима из Увода у структуру материје, увео је више показних огледа са циљем демонстрирања елементарних физичко-хемијских закона а уз помоћ студентима лако доступних реквизита. Овом послу он је приступио одговорно, дисциплиновано али и са вољом и ентузијазмом што се, измађу осталог, види и по оценама на студентским анкетама, које су у интервалу 4,00 до 4,80.

Био је ментор у изради два дипломска рада и члан комисија у одбрани три дипломска рада

Г. Књиге и уџбеници

1. Радомир Ранковић, „Атомистика – задаци и вежбе”, Факултет за физичку хемију, Београд, 2010. СР 539.1(075.8)(076), ISBN 978-86-82139-35-5.

Од избора у звање доцента, објављено је и друго издање практикума (2016).

Д. Научно-истраживачка делатност

Др Радомир Ранковић је коаутор 9 научних радова, од тога су 4 рада објављена у врхунским међународним часописима (катеорије M_{21}), 3 рада у истакнутим међународним часописима (катеорије M_{22}) а 2 рада су објављена у међународном часопису (катеорије M_{23}). Има и 4 саопштења на међународним и домаћим научним скуповима.

После избора у звање доцента, кандидат је објавио један рад у врхунском међународном часопису (катеорије M_{21}), један у истакнутом међународном часопису (катеорије M_{22}) и један у међународном часопису (катеорије M_{23}).

Сви радови кандидата су из области Квантне хемије. Они се базирају на примени квантномеханичког *ab initio* поступка, скупа метода помоћу којих се теоријски проучава структура атома и молекула, решавањем Шредингерове једначине, и интерпретирају и предвиђају њихови спектри. Пет радова објављено је на 57 страна у престижним научним часописима за физичку хемију/квантну хемију, *J. Chem. Phys., Chem. Phys., Mol. Phys.* Девети рад (референца 3.2) представља веома обиман (46 страна штампаног текста уз 7 страна додатног материјала) рад монографског карактера у међународном часопису. На три од ових радова кандидат је први аутор.

Радови у врхунским међународним часописима (M_{21})

После последњег избора

1.1 М. 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 $C_2H_2^{+}$ ”, *The Journal of Chemical Physics* 142 (2015) 174306
IF (2015) 2.950 (9/35 Physics, Atomic, Molecular & Chemical)
<https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/25956099>

Пре последњег избора

1.2 М. Perić, S. Jerosimić, **R. Ranković**, M. Krmar, J. Radić-Perić, „An *ab initio* model for handling the Renner-Teller effect in tetra-atomic molecules. I. Introduction of coordinates and the Hamiltonian”, *Chemical Physics* 330 (2006) 60.
IF (2004) 2.316 (9/34 Physics, Atomic, Molecular & Chemical)
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301010406004228?via%3Dihub>

1.3 **R. Ranković**, S. Jerosimić, M. Perić, „Theoretical investigation of the vibronic spectrum in the $X^2\Pi_u$ electronic state of C_6^{+} ”, *The Journal of Chemical Physics* 128 (2008) 154302.
IF (2008) 3.149 (5/31 Physics, Atomic, Molecular & Chemical)
<http://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.2894312>

1.4 **R. Ranković**, S. Jerosimić, M. Perić, „Theoretical investigation of vibronic and spin-orbit effects in the ground $X^2\Pi_u$ electronic state of the dicyanoacetylene cation”, *The Journal of Chemical Physics* 135 (2011) 024314.
IF (2011) 3.333 (7/33 Physics, Atomic, Molecular & Chemical)
<http://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.3608913>

Радови у истакнутим међународним часописима (M22):

После последњег избора

2.1 M. Mitić, **R. Ranković**, M. Milovanović, S. Jerosimić, M. Perić, „Underlying theory of a model for the Renner-Teller effect in any-atomic molecules on example of the $X^2\Pi_u$ electronic state of C_5^- ”, *Chemical Physics* 464 (2016) 55
IF (2016) 1.747 (19/36 Physics, Atomic, Molecular & Chemical)
<http://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.4919285>

Пре последњег избора

2.2 M. Mladenović, M. Perić, **R. Ranković**, B. Engels, „An *ab initio* study of the hyperfine structure in the $X^2\Pi$ electronic state of HCCS-calculation of vibronically averaged components of the anisotropic hyperfine tensor”, *Molecular Physics* 103 (2005) 587.
IF (2003) 1.591 (15/33 Physics, Atomic, Molecular & Chemical)
<http://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/00268970412331332097>

2.3 M. Perić, **R. Ranković**, S. Jerosimić, „Renner-Teller effect in six-atomic molecules: *Ab initio* investigation of the vibronic spectrum of C_6^- ”, *Chemical Physics* 344 (2008) 35.
IF (2008) 1.961 (13/31 Physics, Atomic, Molecular & Chemical)
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301010407005472>

Радови у међународним часописима (M23):

После последњег избора

3.1 M. Mitić, M. Milovanović, **R. Ranković**, S. Jerosimić, M. Perić, „Variational calculation of the vibronic spectrum in the $X^2\Pi_u$ electronic state of C_6^- ”, *J. Serb. Chem. Soc.* (2018) doi: JSC171129001M
<http://www.shd-pub.org.rs/index.php/JSCS/article/view/6223>

Пре последњег избора

3.2* **R. Ranković**, S. Stojadinović, M. Sarvan, B. Kasalica, M. Krmar, J. Radić-Perić, M. Perić, „A multidisciplinary study on magnesium (Review)”, *J. Serb. Chem. Soc.* 77(11) (2012), 1483.
IF (2011) 0.879 (103/154 Chemistry, Multidisciplinary)
http://www.shd.org.rs/JSCS/Vol77/No11/01_5482_4367.pdf

* Рад монографског карактера написан на 46 страна

Саопштења са међународних скупова штампана у изводу (M34)

После последњег избора

Пре последњег избора

4.1 **R. Ranković**, „Ab initio investigation of structure and vibrational frequencies of HCO_3^- in the gas phase and solutions“, The 2nd Opatija Meeting on Computational Solutions in the Life Sciences, 4th – 9th September 2007, Opatija, Croatia, The Book of Abstracts, p. 82.

4.2 **R. Ranković**, „Ab initio investigation of vibronic spectrum of the $X^2\Pi_u$ state of the C_6^{--} “, Humboldt Conference on Noncovalent Interactions, 15th-18th November 2007, Vršac, Serbia, The Book of Abstracts, p.54.

Саопштења са скупова националног значаја штампана у изводу (M64)

После последњег избора

Пре последњег избора

5.1 **R. Ranković**, S. Jerosimić and M. Perić, „Perturbation theory in Calculation of Vibronic Spectrum in the $X^2\Pi_u$ State C_6^{--} “, 1st National Conference on Electronic, Atomic, Molecular and Photonic Physics, 15th-18th May 2008, Zaječar, Serbia, The Book of Abstracts, p.23.

5.2 **R. Ranković**, S. Jerosimić and M. Perić, „Theoretical investigation of vibronic and spin-orbit effects in the ground $X^2\Pi_u$ electronic state of the dicyanoacetylene cation“, 2nd National Conference on Electronic, Atomic, Molecular and Photonic Physics, 21st – 25th June 2011, Belgrade, Serbia, The Book of Abstracts, p. 110.

Преглед радова

Радови објављени пре избора у звање доцента

Радови 1.2, 1.3, 1.4, 2.2 и 2.3 посвећени су теоријском проучавању тзв. Ренер–Телеровог ефекта у вишеатомским молекулима. Ова веома важна манифестација нарушавања применљивости Борн–Опенхајмерове апроксимације, на којој се базира како решавање молекулске Шредингерове једначине, тако и анализа резултата молекулске спектроскопије, интензивно се истражује више од 80 година, али претежно на троатомским молекулима и обично у њиховим Π електронским стањима. Прелазак на молекуле са више од три атома знатно усложњава ситуацију и зато постоји веома мало студија већ на четвороатомским

системима, а пре радова кандидата није био публикован ниједан рад на молекулима са више од четири атома.

У првом раду кандидата, 2.2. проучавани су ефекти настали услед интензивне вибрационо-електронске (вибронске), спин-орбитне и магнетне хиперфине спреге у спектру молекула НССС. Резултати рада омогућили су поуздану интерпретацију постојећих експерименталних података и предикцију резултата будућих мерења. У опсежном раду 1.2 показано је да је Ренер–Телеров ефекат у четвороатомским молекулима корелиран са другом манифестацијом вибронске спеге, Јан–Телеровим ефектом, односно појавама које су последица (избегнутог) пресецања површи потенцијалне енергије. Разрађен је модел који омогућава третирање ових феномена, као и њихове интеракције са релативистичким ефектима, као спин–орбитном спрегом. Модел је постављен не само за П, већ и за Δ, Φ, и остала електронска стања.

У радовима 1.3, 1.4 и 2.3 приказана је метода за *ab initio* проучавање вибронске и спин-орбитне спреге у шеастоатомским молекулима са равнотежном линеарном геометријом. Као што је већ споменуто, реч је о првим истраживањима ове врсте у свету. Уведен је теоријски модел, развијен квантномеханички пертурбациони поступак за решавање одговарајуће Шредингерове једначине, написан рачунарски програм и изведена су рачунања на молекуларним јонима C_6^- , C_6^+ и NC_4N^+ . Коришћењем програмских пакета GAUSSIAN и MOLPRO израчунате су равнотежне геометрије, спин–орбитне константе и потенцијалске површи за основна стања ових молекула. И у овим случајевима теоријска анализа коришћена је за интерпретацију и предикцију резултата експеримената.

У раду 3.2, приказана је једна мултидисциплинарна студија на молекулу MgO. Емисиони спектар добијен у току процеса плазмене електролитичке оксидације магнезијума кориштен је за идентификацију атомских и молекулских врста, као и за одређивање температуре плазме. При томе су коришћени квантохемијски и квантомеханички теоријски поступци, а истраживање је завршено рачунањем састава плазме у локалној термичкој равнотежи. То је допринело расветљавању процеса који се догађају за време електролитичке оксидације магнезијума.

Радови објављени после избора у звање доцента

Рад 1.1. представља прву експлицитну потврду исправности метода за *ab initio* проучавање вибронске и спин-орбитне спреге у четвороатомским молекулима са равнотежном линеарном геометријом. У претходним публикацијама, наиме, исправност модела проверавана је индиректно тако што су се неки кључни параметри као неадијабатски матрични елементи рачунали на основу зависности других величина (нпр. диполних и квадруполних момената) од геометрије молекула. У овом раду директно су израчунати потребни неадијабатски матрични елементи и упоређени са онима који следе из модела. Констатовано је веома добро слагање. Напоменимо да је рад прихваћен у штампу без икаквих захтева за корекцијама.

У раду 2.1. трасиран је пут за проучавање комбиноване вибронске и спин-орбитне интеракције у молекулима са произвољним бројем језгара и линеарном равнотежном геометријом. Написан је први рачунарски програм за варијационо третирање вибронске и спин-орбитне спреге у петоатомским молекулима. Изведено је рачунање спектра $X^2\Pi_u$

електронског стања молекула (јона) C_5^- . Резултати су омогућили поуздану интерпретацију одговарајућих експерименталних података.

У раду 3.1 развијена је метода за проучавање *ab initio* вибронске и спин-орбитне спреге у шестоатомским молекулима. Резултати су примењени на рачунање спектра у $X^2\Pi_u$ електронском стању молекула C_6^- . Рачунарски програм написан у ову сврху може се, уз незнатне модификације, применити на третирање вибронске и спин-орбитне спреге у било ком молекулу са линеарном равнотежном геометријом.

6. Цитати

Др Радомир Ранковић је према подацима *Web of Science* укупно цитиран 30 пута, од тога 12 пута без аутоцитата.

Ђ. Учешће у научним пројектима и међународна сарадња

Др Радомир Ранковић је учествовао или учествује у реализацији следећих научних пројеката:

1. „Структура и динамика молекулских система у основним и побуђеним електронским стањима“, пројекат Министарства просвете и науке Републике Србије бр. 172040 (2010-2014), руководилац пројекта проф. Миљенко Перић, редовни члан САНУ. Од 2014. руководилац пројекта доц. др Михајло Етински.
2. „Структурне модификације и реакције микропорозних и мезопорозних материјала“, пројекат Министарства науку и технологију Републике Србије бр. 142055 (2005-2010), руководилац пројекта проф. Вера Дондур.

Е. Остале активности

Др Радомир Ранковић је ангажован на популаризацији Физичке хемије као науке и Факултета за физичку хемију, и то у склопу манифестација и програма као што су „Фестивал науке” и „Наука око нас”. Више пута је био предавач по позиву у Истраживачкој станици Петница.

Ж. Закључак

Др Радомир Ранковић има докторат физичкохемијских наука. Објавио је укупно 9 научних радова, од тога су 4 рада објављена у врхунским међународним часописима (категорије M_{21}), 3 рада у истакнутим међународним часописима (категорије M_{22}), а 2 рада у међународном часопису (категорије M_{23}). На 3 рада први је аутор. Има и 4 саопштења (штампана у изводу) на међународним (2) и на домаћим (2) научним скуповима, па укупан број поена (60,4), којим се исказује научна компетентност, превазилази онај број који је неопходан према Критеријумима, било Факултета за физичку хемију или Већа научних области природних наука. Радови кандидата су према подацима *Web of Science* укупно цитирани 30 пута, од тога 12 пута без аутоцитата.

Сви научни радови кандидата као и докторска теза су из области Квантне хемије, дакле из уже научне области за коју је конкурс расписан. Они се базирају на примени квантномеханичког *ab initio* поступка, скупа метода помоћу којих се теоријски проучава структура атома и молекула, решавањем Шредингерове једначине, и интерпретирају и предвиђају њихови спектри, чиме је исказана компетентност кандидата да предаје предмете Атомистика и Увод у структуру материје.

Основна делатност др Радомира Ранковића у периоду од избора у звање доцента састојала се у преузимању предавања и организацији вежби из два обавезна курса за студенте физичке хемије. То је захтевало изузетно велики ангажман, а последица тога је мали број објављених научних радова. Треба, међутим, имати у виду да су ове публикације веома сложене по структури и да су захтевале дуготрајан рад који је укључивао различите фазе: развој модела, писање одговарајућих рачунских програма, рачунање електронске структуре разматраних система уз коришћење како комерцијалних програмских пакета тако и поменутих оригиналних рачунарских кодова. Основна област рада кандидата, истраживање вибронске и спин-орбитне структуре у молекулима са линеарном равнотежном геометријом, једна је од најзначајнијих када је реч о структури спектра релативно малих молекула. Већина до сада објављених публикација односи се, међутим, на троатомске молекуле, веома мали број на четвороатомске. Када је реч о молекулима са више од четири атома др Радомир Ранковић је коаутор практично свих објављених теоријских радова. За очекивати је да ће ови радови бити знатно више цитирани у будућности, када буду експериментално снимљени одговарајући вибронски спектри.

Др Радомир Ранковић је читав низ година био асистент на предметима Атомистика и Увод у структуру материје (поред тога што је водио вежбе и на другим предметима Факултета за физичку хемију), па је стекао и велико искуство у раду са студентима. Наставној активности је врло посвећен обављајући је савесно и одговорно. Високо је оцењен и на студентским анкетама (од 4,00 - 4,80). Нарочито бисмо истакли да је др Радомир Ранковић објавио помоћни уџбеник „Атомистика - задаци и вежбе“, 2010. године (друго издање 2016) и то као једини аутор. Био је ментор у изради два дипломска рада и члан комисија у одбрани три дипломска рада.

Можемо закључити да је у досадашњем раду, др Радомир Ранковић остварио запажене резултате у научној области којом се бави и тиме показао да има смисла за научни рад, стекао велико искуство у раду са студентима и показао смисао за педагошки рад. Био је ангажован у развоју наставе и другим делатностима које су важне за развој Факултета за физичку хемију.

На основу изложених података види се да доцент др Радомир Ранковић испуњава све услове из чланова 64 и 65 Закона о високом образовању, чланова 121-125 Статута Универзитета у Београду и чланова 130-135 Статута Факултета за физичку хемију Универзитета у Београду, као и интерне критеријуме Факултета за физичку хемију за избор у звање и на радно место **доцент**.

На основу анализе целокупне наставне и научно-истраживачке активности др Радомира Ранковића, обима и квалитета његовог досадашњег рада, предлажемо Изборном већу Факултета за физичку хемију и Већу научних области природних наука Универзитета у Београду, да изаберу **др Радомира Ранковића** у звање и на радно место **доцент** за ужу научну област **Физичка хемија - Квантна хемија, а за предмете Атомистика и Увод у структуру материје** на Факултету за физичку хемију Универзитета у Београду.

У Београду 1.2.2018

Комисија

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

др Драгомир Станисављев, редовни професор
Факултет за физичку хемију, Универзитет у Београду

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

др Горан Попарић, ванредни професор
Физички факултет, Универзитет у Београду

др Михајло Етински, доцент
Факултет за физичку хемију, Универзитет у Београду

Табела вредности индикатора наставне и педагошке компетентности др Радомира Ранковића

Назив и ознака групе	Укупно	Од претходног избора
П11 Оцена наставне активности	5	5
П22 Кандидат је модификовао постојећи наставни програм предмета	2	2
П23 Осавремењивање наставе и наставних средстава	2	2
П32 Објављен помоћни уџбеник, практикум или збирка задатака	5	5
П49 Ментор одбрањеног дипломског рада	$1,5 \times 2 = 3$	$1,5 \times 2 = 3$
П50 Члан комисије одбрањеног дипломског рада	$0,3 \times 3 = 0,9$	$0,3 \times 3 = 0,9$
Укупно	17,9	17,9

Табела вредности индикатора научне компетентности др Радомира Ранковића

Врста резултата	М	Укупно	Од претходног избора
Рад у врхунском међународном часопису	M_{21}	$8 \times 4 = 32$	$8 \times 1 = 8$
Рад у истакнутом међународном часопису	M_{22}	$5 \times 3 = 15$	$5 \times 1 = 5$
Рад у међународном часопису	M_{23}	$3 \times 2 = 6$	$3 \times 1 = 3$
Саопштења са међународних скупова штампана у изводу	M_{34}	$0,5 \times 2 = 1$	/
Саопштења са домаћих скупова штампана у изводу	M_{64}	$0,2 \times 2 = 0,4$	/
Одбрањена докторска дисертација	M_{71}	$6 \times 1 = 6$	
Укупан број поена ($M_{10} - M_{120}$)		60,4	16
$M_{21} + M_{22} + M_{23}$		53	16
$M_{34} + M_{64}$		1,4	/

Табела 3. Минимално потребни и остварени поени кандидата др Радомира Ранковића за реизбор у универзитетско звање доцент према критеријуму Већа научних области природних наука Универзитета у Београду.

Од претходног избора	Укупно
Потребно: 3 рада (3 M_{23})	Потребно: 8 радова ($1M_{21} + 1M_{22} + 6M_{23}$)
Остварено: 3 рада (1 $M_{21} + 1 M_{22} + 1 M_{23}$)	Остварено: 9 радова (4 $M_{21} + 3 M_{22} + 2 M_{23}$)