

**NASTAVNO-NAUČNOM VEĆU
TEHNOLOŠKO-METALURŠKOG FAKULTETA
UNIVERZITETA U BEOGRADU**

Na sednici Nastavno-naučnog veća Tehnološko-metalurškog fakulteta Univerziteta u Beogradu održanoj 25.10.2012. imenovani smo za članove Komisije za ocenu i odbranu doktorske disertacije mr Marije Vukčević (rođena Bačić), dipl. inž. tehnologije pod naslovom:

**Uticaj morfologije i površinskih grupa nanoporoznih ugljeničnih materijala na adsorpciju
pesticida iz vode.**

Posle pregleda i analize dostavljenog materijala, Komisija podnosi sledeći

**IZVEŠTAJ
o urađenoj doktorskoj disertaciji**

1. UVOD

Naslov i obim disertacije

Doktorska disertacija pod naslovom „Uticaj morfologije i površinskih grupa nanoporoznih ugljeničnih materijala na adsorpciju pesticida iz vode“, kandidata mr Marije Vukčević, dipl. inž. tehnologije, napisana je na 159 strana, sadrži 95 slika, 35 tabelai 178 literaturnih navoda. Sadržaj teze ima uobičajenu strukturu: Rezime (na srpskom i engleskom jeziku), Uvod, Teorijski deo, Eksperimentalni deo, Rezultati i diskusija, Zaključak, Literatura i Prilozi.

Hronologija odobravanja i izrade disertacije

- 29.03.2012. godine – na sednici Nastavno-naučnog veća Tehnološko-metalurškog fakulteta doneta je Odluka o prihvatanju predloga teme doktorske disertacije mr Marije Vukčević, dipl. inž. tehnologije, pod naslovom „Uticaj morfologije i površinskih grupa nanoporoznih ugljeničnih materijala na adsorpciju pesticida iz vode“, a za mentora je imenovana dr Mila Laušević, redovni profesor TMF.
- 26.04.2012. godine – na sednici Veća naučnih oblasti prirodnih nauka Univerziteta u Beogradu data je saglasnost na predlog teme doktorske disertacije mr Marije Vukčević, dipl. inž. tehnologije, pod naslovom „Uticaj morfologije i površinskih grupa nanoporoznih ugljeničnih materijala na adsorpciju pesticida iz vode“.
- 25.10.2012. godine – na sednici Nastavno-naučnog veća Tehnološko-metalurškog fakulteta doneta je Odluka o imenovanju članova Komisije za ocenu i odbranu doktorske disertacije mr Marije Vukčević, dipl. inž. tehnologije pod naslovom: „Uticaj morfologije i površinskih grupa nanoporoznih ugljeničnih materijala na adsorpciju pesticida iz vode“.

Mesto disertacije u odgovarajućoj naučnoj oblasti

Istraživanja u okviru ove doktorske disertacije pripadaju naučnoj oblasti Hemija i hemijska tehnologija za koju je matičan Tehnološko-metalurški fakultet Univerziteta u Beogradu.

Biografski podaci o kandidatu

Kandidat mr Marija Vukčević, rođena je 22.03.1975. godine u Trsteniku. Na Tehnološko-metalurški fakultet Univerziteta u Beogradu upisala se 1994. godine, na odsek za Neorgansku hemijsku tehnologiju, na kom je diplomirala 2002. god., sa temom „Ispitivanje karakteristika aktivne površine ugljeničnih tkanina“. Poslediplomske studije, smer Analitička hemija u tehnološkoj kontroli, upisala je školske 2002/2003. na Tehnološko-metalurškom fakultetu i uspešno položila sve ispite predviđene planom i programom sa prosečnom ocenom 10,00. Magistarsku tezu pod nazivom „Karbonski materijali u procesu dezinfekcije vode“ uspešno je odbranila jula 2007. godine, pod mentorstvom prof. dr Mile Laušević i stekla zvanje magistra tehničkih nauka.

Od februara 2003. godine radi kao istraživač na Tehnološko-metalurškom fakultetu, gde je decembra 2003. godine izabrana u zvanje istraživač pripravnik. U zvanje istraživač saradnik prvi put je izabrana novembra 2007. a u maju 2011. ponovo je izabrana u isto zvanje.

Član je Srpskog hemijskog društva.

Oblast naučno-istraživačkog rada Marije Vukčević obuhvata razvoj metoda dobijanja nanoporoznih materijala i modifikacije njihove površine sa ciljem primene tako dobijenih materijala kao filtera za uklanjanje zagađujućih materija i dezinfekciju vode i kao sorbenata za predkoncentrisanje analita metodom ekstrakcije na čvrstoj fazi.

Od 2003. godine Marija Vukčević je uključena u projekte finansirane od strane Ministarstva za nauku i tehnološki razvoj Republike Srbije, odnosno Ministarstva za prosvetu i nauku Republike

Srbije. U toku dosadašnjeg rada, u svojstvu autora i koautora objavila je 11 radova u časopisima od međunarodnog značaja i imala veći broj saopštenja na međunarodnim konferencijama. Angažovana je kao saradnik na eksperimentalnim vežbama iz predmeta Instrumentalne metode i Instrumentalne metode II na Katedri za analitičku hemiju i kontrolu kvaliteta, Tehnološko-metalurškog fakulteta.

2. OPIS DISERTACIJE

Struktura i sadržaj disertacije

Doktorska disertacija mr Marije Vukčević sadrži sledeća poglavlja: Uvod, Teorijski deo, Eksperimentalni deo, Rezultate i diskusiju, Zaključak i Literaturu. Na početku disertacije dat je Rezime na srpskom i engleskom jeziku.

Kratak prikaz pojedinačnih poglavlja

U uvodnom delu predstavljeni su trendovi razvoja novih ugljeničnih materijala i tendencije korišćenja otpadnih materijala, kao polaznih sirovina za njihovo dobijanje. U tom smeru, razmatrana je proizvodnja karbon monolita i karbonizovanih vlakana konoplje, uz osvrt na njihove strukturne karakteristike. Prikazan je značaj uspostavljanja korelacije između svojstava polazne sirovine, parametra dobijanja, funkcionalizacije površine i karakteristika dobijenih ugljeničnih materijala, kao i izbora optimalnih parametara za dobijanje materijala željenih karakteristika. Takođe, u uvodnom delu jasno su predstavljeni ciljevi ove doktorske disertacije.

Teorijski deo doktorske disertacije podeljen je na četiri poglavlja: Ugljenični materijali, Karakteristike ugljeničnih materijala, Adsorpcija kao fizičko-hemijski proces i Spontano taloženje srebra na površini ugljeničnih materijala. U prvom poglavlju, prikazani su karbonizacija i aktivacija kao procesi za dobijanje aktiviranih ugljeničnih materijala: karbon monolita i ugljeničnih materijala na bazi otpadne biomase. U poglavlju Karakteristike ugljeničnih materijala, kao najvažniji parametri koji određuju veličinu i intenzitet adsorpcije, predstavljeni su specifična površina i poroznost, kiseonične površinske grupe i površinsko naelektrisanje. U poglavlju Adsorpcija kao fizičko-hemijski proces, opisan je proces adsorpcije sa aspekta adsorpcionih izoterma i adsorpcione kinetike. Dat je pregled relevantnih literaturnih istraživanja, koja se odnose na korišćenje ugljeničnih materijala u adsorpciji zagađujućih materija, prvenstveno teških metala i pesticida, i upotrebu ugljeničnih materijala kao sorbenta pesticida u metodi ekstrakcije na čvrstoj fazi. U četvrtom poglavlju predloženi su mogući mehanizmi spontanog taloženja srebra na površini ugljeničnih materijala, kao i uticaji površinskih karakteristika ugljeničnih materijala na količinu i strukturu depozita srebra. Opisan je i mehanizam bakterioidnog dejstva srebra, kao i mogućnost korišćenja ugljeničnih materijala impregniranih srebrom u dezinfekciji vode.

U Eksperimentalnom delu, dati su eksperimentalni uslovi ispitivanja uticaja strukture polazne sirovine i parametara proizvodnje ugljeničnih materijala, na njihove karakteristike. Definirani su parametri dobijanja i modifikacije korišćenih materijala. Predstavljene su metode karakterizacije površine ugljeničnih materijala: određivanje specifične površine i poroznosti BET metodom; određivanje vrste i količine funkcionalnih grupa, metodom temperaturno programirane desorpcije (TPD) i kiselo/bazne titracije; određivanje tačke nultog naelektrisanja površine, metodom masene titracije; ispitivanje strukture površine i morfologije ugljeničnih materijala, kao i morfologije depozita srebra na površini ugljeničnih materijala, skenirajućom elektronskom mikroskopijom (SEM) i rendgenska difrakciona analiza (XRD) za ispitivanje kristalne strukture depozita srebra. Predstavljeni su eksperimentalni uslovi adsorpcije teških metala i pesticida, spontanog izdvajanja srebra i optimizacije metode ekstrakcije na čvrstoj fazi. Dati su parametri metode tečne hromatografije –tandem masene spektrometrije (HPLC-MS/MS) za određivanje koncentracije pesticida, kao i maseni hromatogrami ispitivanih pesticida.

U delu Rezultati i diskusija, eksperimentalno dobijeni rezultati detaljno su analizirani i diskutovani u okviru sedam poglavlja. U poglavlju Ispitivanje uticaja polazne sirovine na karakteristike karbonizovanih vlakana konoplje, izvršena je hemijska modifikacija kratkih vlakana konoplje pre karbonizacije i ispitan je uticaj hemijske strukture i morfologije ugljeničnog prekursora na svojstva karbonizovanog materijala. Smanjenje sadržaja lignina i hemiceluloze do kog dolazi usled hemijskog tretmana utiče na smanjenje specifične površine rezultujućih karbonizovanih vlakana konoplje, dok polimorfna transformacija celuloze I u celulozu II dovodi do povećanja specifične površine. TPD analiza je pokazala da posle hemijskog tretmana ugljeničnog prekursora dolazi do povećanja količine površinskih grupa koje otpuštaju CO, i smanjenja količine površinskih grupa koje otpuštaju CO₂. Skenirajuća elektronska mikroskopija pokazuje delimičnu ili potpunu fibrilaciju karbonizovanih vlakana konoplje, a ove promene u morfologiji su takođe posledica hemijskog modifikovanja. Razlike

u površinskim karakteristikama koje su posledica osobina ugljeničnog prekursora, dovode do razlika u adsorpcionim osobinama karbonizovanog materijala.

U okviru poglavlja Dobijanje uzoraka aktiviranih vlakana konoplje i karbon monolita prvo je ispitivan mehanizam aktivacije korišćenjem KOH kao aktivirajućeg agensa. Temperaturno-programirana desorpcija u kombinaciji sa masenom spektrometrijom (TPD-MS) korišćena je za ispitivanje procesa aktivacije karbonizovanih vlakana konoplje. Na osnovu eksperimentalnih zapažanja predložen je mehanizam aktivacije karbonizovanih vlakana konoplje. Variranjem temperature karbonizacije, temperature aktivacije i odnosa količina aktivirajućeg agensa i karbonizovanog materijala, dobijeni su uzorci ugljeničnih materijala različitih površinskih karakteristika. Pokazano je da se karbonizacijom u temperaturnom intervalu od 700-1000°C i aktivacijom na 900°C dobijaju materijali razvijene specifične površine i dobrih adsorpcionih karakteristika. Optimalni parametri proizvodnje odabrani su na osnovu kapaciteta materijala za adsorpciju pesticida: temperatura karbonizacije 1000°C, odnos aktivacioni agens:karbonizovani materijal 2:1 i temperatura aktivacije 900°C.

U poglavlju Karakterizacija površine aktiviranih vlakana konoplje i karbon monolita izvršena je određivanjem poroznosti, specifične površine i količine površinskih kiseoničnih grupa. Dobijeni rezultati pokazuju da su aktivirana vlakna konoplje i karbon monolit mikroporozni materijali sa najvećim udelom pora prečnika ispod 2 nm. Povećanjem udela aktivirajućeg agensa dolazi do neznatnog povećanja mezoporoznosti. Pokazano je da se dvostepenim procesom karbonizacije i aktivacije, uz korišćenje KOH kao aktivirajućeg agensa mogu dobiti materijali visokih vrednosti specifične površine ($S_{BET} = 2192 \text{ m}^2/\text{g}$). Desorpcioni profili CO i CO₂, dobijeni tokom TPD analize, kod svih ispitivanih uzoraka pokazuju prisustvo intenzivnog pika na relativno visokim temperaturama, koje ukazuje na prisustvo anhidridnih grupa na površini aktiviranih vlakana konoplje i karbon monolita. Povećanjem udela aktivirajućeg agensa do odnosa KOH:karbonizovani materijal=2:1, rastu vrednosti specifične površine i količine površinskih kiseoničnih grupa. Daljim povećanjem količine KOH dolazi do smanjenja specifične površine i količine površinskih kiseoničnih grupa ispitivanih materijala. Skanirajućom elektronskom mikroskopijom pokazane su promene u morfologiji površine aktiviranih vlakana konoplje koje su najverovatnije posledica aktivacije. Kod aktiviranih vlakana konoplje, karbonizovanih na 1000°C, uočeno je prisustvo longitudinalnih pukotina na površini, dok kod aktiviranih vlakana konoplje karbonizovanih na 700°C dolazi do obrazovanja nanozidova.

U okviru poglavlja Izdvajanje srebra na površini aktiviranih ugljeničnih materijala, pokazano je da kiseonične grupe imaju dominantan uticaj na adsorpciju srebra, i da se povećanjem količine kiseoničnih grupa koje termalnom dekompozicijom otpuštaju CO može povećati količina i smanjiti veličina kristalita depozita Ag. Aktivirana vlakna konoplje i karbon monolit impregnirani srebrom pokazuju jako antimikrobno dejstvo na smešu *Escherichia coli*, *Staphylococcus aureus* i *Candida albicans*.

U poglavlju Adsorpcija teških metala, pokazano je da adsorpcioni kapacitet karbonizovanih vlakana konoplje raste sa porastom početne koncentracije metala u rastvoru. U rastvoru niže koncentracije na adsorpcioni kapacitet utiče količina površinskih kiseoničnih grupa, dok u koncentrovanijim rastvorima primarni uticaj na adsorpciju teških metala ima specifična površina. Ispitivanje kinetike je pokazalo da se adsorpcija teških metala na karbonizovanim vlaknima konoplje pokorava kinetici pseudo-drugog reda. Eksperimentalni podaci dobijeni adsorpcijom olova iskorišćeni su za matematičko modelovanje procesa transporta jona kroz poroznu matricu karbonizovanih vlakana konoplje, kao i karakteristika njihove površinske strukture. Dobra slaganja dobijena između parametara modela i eksperimentalnih podataka ukazuju na mogućnost korišćenja modela za optimizovanje procesa adsorpcije kao i performansi samog adsorbenta. Ovakvo modelovanje procesa od izuzetnog je značaja pri korišćenju karbonizovanih vlakana konoplje kao filtera za prečišćavanje vode zagađene teškim metalima.

U okviru poglavlja Adsorpcija pesticida, adsorpcija pesticida na uzorcima aktiviranih vlakana konoplje i karbon monolita vršena je iz rastvora smeše pesticida (acetaniprida, dimetoata, nikosulfurona, karbofurana i atrazina). Pad koncentracije pesticida u rastvoru tokom adsorpcije praćen je metodom tečne hromatografije u kombinaciji sa tandem masenom spektrometrijom. Svi ispitivani uzorci materijala pokazuju dobra sorpciona svojstva, a najviše vrednosti sorpcionog kapaciteta dobijene su za uzorke sa najvećom količinom površinskih kiseoničnih grupa. Prilikom adsorpcije pesticida, koji u svojoj strukturi sadrže aromatični prsten, pokretačka sila za adsorpciju je interakcija između π elektrona u strukturi pesticida i π elektrona na površini karbonskog materijala, pa povećanje količine kiseoničnih grupa na površini materijala dovodi do pada adsorpcionog kapaciteta. Prilikom adsorpcije pesticida koji u svojoj strukturi pored aromatičnog prstena poseduju i razgranati supstituent na prstenu, kao i pesticida koji nemaju aromatičnu strukturu, povećanje ukupne količine i količine kiselih grupa povoljno utiče na efikasnost sorpcije. Na osnovu dobijenih rezultata može se zaključiti da vrsta i količina površinskih kiseoničnih grupa ima dominantan uticaj na adsorpcioni kapacitet, dok specifična

površina nema presudnog uticaja na adsorpciju pesticida. Tretiranje ravnotežnih podataka dobijenih u adsorpciji pesticida na površini aktiviranih vlakana konoplje Frojndlihovim i Lengmirovim adsorpcionim modelima primećeno je bolje slaganje sa Lengmirovim modelom. Ispitivanje kinetike je pokazalo da se adsorpcija pesticida na aktiviranim vlaknima konoplje pokorava kinetici pseudo-drugog reda.

U poglavlju Metoda ekstrakcije na čvrstoj fazi, ispitana je mogućnost korišćenja karbonizovanih i aktiviranih vlakana konoplje kao sorbenata u metodi ekstrakcije na čvrstoj fazi, za analizu pesticida iz vodenih rastvora. Na osnovu dobijenih prinosa ispitivanih pesticida, kao optimalni rastvarač za eluiranje analita odabrana je smeša dihlormetan-metanol (1:1), dok je za optimalnu pH vrednost vodenog rastvora pesticida odabrana pH 6. Optimizovana SPE procedura korišćena je za ispitivanje mogućnosti upotrebe različitih uzoraka karbonizovanih i aktiviranih vlakana konoplje kao SPE sorbenata. Karbonizovana vlakna konoplje dobijena nakon modifikacije prekursora, mogu se koristiti kao SPE sorbenti za ekstrakciju tiametoksama, monokrotofosa, imidokloprida, acetamiprida, tebufenozida i fenheksamida. Aktivirana vlakna konoplje mogu se uspešno koristiti kao sorbenti u metodi ekstrakcije na čvrstoj fazi za određivanje: acefata, tiametoksama, monokrotofosa, imidokloprida, acetamiprida, dimetoata, simazina, karbofurana, atrazina, propazina, malationa i tebufenozida iz vodenih rastvora. U slučaju acefata, dimetoata, simazina, karbofurana, propazina, malationa i tebufenozida, prinosi dobijeni korišćenjem aktiviranih vlakana konoplje kao SPE sorbenta, viši su od prinosa dobijenih komercijalnim kertridžima.

3. OCENA DISERTACIJE

Savremenost, originalnost i značaj

Poslednjih godina sve više pažnje se poklanja korišćenju jeftinih i lako dostupnih materijala kao polaznih sirovina u proizvodnji aktivnog uglja kao i razvoju novih ugljeničnih materijala koji se, zahvaljujući svojim poboljšanim karakteristikama, mogu koristiti kao alternativa aktivnom uglju. Mogućnost korišćenja različitih polaznih sirovina u proizvodnji ugljeničnih materijala nanoporozne strukture, razvijene specifične površine, visokih vrednosti adsorpcionog kapaciteta i nivoa površinske aktivnosti, proširuje oblast primene ovih materijala. Veliki broj ispitivanja odnosi se na mogućnost upotrebe biomase i različitih otpadnih materijala, pre svega lignoceluloznih, kao prekursora za proizvodnju ugljeničnih materijala.

Iako postoji veliki broj ispitivanja vezanih za dobijanje novih ugljeničnih materijala, naročito polazeći od jeftinih i lako dostupnih sirovina, ona i dalje ne gube na aktuelnosti jer ovakva upotreba otpadnog materijala predstavlja specifičan način reciklaže i uklanjanja otpada. U ovoj doktorskoj disertaciji razvijena je metoda za dobijanje karbon monolita i karbonizovanih vlakana konoplje, polazeći od kratkih i zamršenih otpadnih vlakna konoplje. Korišćenje različitih polaznih sirovina, modifikacija polaznih sirovina kao i variranje parametara karbonizacije i aktivacije, omogućava određivanje optimalnih parametara za razvoj metode dobijanja ugljeničnih materijala željenih površinskih karakteristika. Izborom odgovarajućih parametara aktivacije i modifikacije izvršeno je ciljano uvođenje i supstitucija oksidnih grupa na nezasićenim ugljenikovim atomima. Na taj način povećava se efikasnost procesa proizvodnje ugljeničnih materijala, i postiže se maksimalno prilagođavanje površine ugljeničnih materijala za adsorpciju. Poboljšane sorpcione karakteristike dobijenih materijala omogućavaju njihovu primenu u procesu prečišćavanja vode, za uklanjanje organskih polutanata i teških metala, i dezinfekciju vode.

Takođe, u ovoj doktorskoj disertaciji razvijen je novi sorbent za metodu ekstrakcije na čvrstoj fazi na bazi aktiviranih vlakana konoplje. Niska cena i dobri rezultati dobijeni primenom ovog sorbenta u predkoncentrisanju pesticida, čine aktivirana vlakna konoplje adekvatnom zamenom za skupe komercijalne kertridže.

Osvrt na referentnu i korišćenu literaturu

U literaturnom pregledu doktorske disertacije dato je 178 literaturnih navoda, od kojih najveći broj čine najnoviji radovi iz međunarodnih časopisa sa tematikom značajnom za izradu doktorske disertacije. Navedene reference su novijeg datuma i sadrže eksperimentalne rezultate istraživanja mnogih istraživača, analizu i diskusiju dobijenih rezultata i izvedene zaključke, kao i teorijske osnove primenjenih metoda ispitivanja, njihove mogućnosti i ograničenja. U okviru korišćenih literaturnih navoda nalaze se i reference kandidata mr Marije Vukčević (rođene Bačić), proistekle iz rezultata istraživanja u oblasti doktorske disertacije, a koje su objavljene u časopisima međunarodnog značaja. Time je kandidat proširio do sada poznata saznanja o postupcima procesa proizvodnje, modifikacije i karakterizacije karbonizovanih i aktiviranih materijala, i mogućnostima njihove primene u realnim uslovima. Iz obrazloženja predložene teme doktorske disertacije i objavljenih radova koje je kandidat

priložio, kao i iz popisa literature koja je korišćena u istraživanju, uočava se adekvatno poznavanje oblasti istraživanja, kao i poznavanje aktuelnog stanja istraživanja u ovoj oblasti u svetu.

Analiza primenjenih naučnih metoda i njihova adekvatnost za sprovedeno istraživanje

U ovoj doktorskoj disertaciji primenjene su savremene naučne metode za karakterizaciju površine ugljeničnih materijala. Površinske karakteristike karbon monolita i karbonizovanih vlakana konoplje ispitane su merenjem specifične površine BET metodom, određivanjem mikro i mezoporoznosti kao i merenjem zapremine mikropora. Sadržaj kiseoničnih površinskih grupa određen je korišćenjem temperaturno-programirane desorpcije sa masenom spektrometrijom (TPD-MS). Morfologija i struktura površine ugljeničnih materijala ispitivana je skanirajućom elektronskom mikroskopijom (SEM). Rendgenska difrakciona analiza (XRD) korišćena je za ispitivanje kristalne strukture depozita srebra na površini ugljeničnih materijala. Za određivanje koncentracije pesticida u rastvoru primenjena je metoda visoko efikasne tečne hromatografije sa tandem masenom spektrometrijom (HPLC-MS/MS), kao najsavremenija tehnika za identifikaciju i kvantitativno određivanje polarnih i termički nestabilnih jedinjenja. Mogućnost primene ovih materijala za uklanjanje teških metala iz vode ispitivana je praćenjem adsorpcije, a pad koncentracije teških metala u rastvoru tokom adsorpcije meren je metodom atomske absorpcione spektrometrije (AAS). Za obradu dobijenih rezultata razvijen je matematički model adsorpcije katjona na površini mikroporoznih ugljeničnih materijala. Antimikrobno dejstvo odabranih ugljeničnih materijala impregniranih srebrom na vodu zagađenu smešom bakterija (*E. coli*, *S. aureus*) i gljivice (*C. albicans*) ispitano je standardnim mikrobiološkim metodama. Mogućnost primene dobijenih ugljeničnih materijala za ekstrakciju pesticida iz vodenih rastvora ispitana je efikasnom i ekonomičnom tehnikom ekstrakcije na čvrstoj fazi, koja spada u savremene načine pripreme uzorka za analizu.

Ocena primenljivosti i verifikacije ostvarenih rezultata

Na osnovu objavljenih literaturnih podataka iz ove oblasti, eksperimentalnih ispitivanja i dobijenih rezultata iz ovog rada, ostvaren je veliki doprinos u razvoju novih sorbenata poboljšanih sorpcionih karakteristika na bazi karbon monolita i aktiviranih vlakana konoplje. Podaci dobijeni ispitivanjem sorpcionih procesa važni su sa aspekta predloženih mehanizama sorpcije i potencijalne primene dobijenih materijala kao sorbenata organskih polutanata i teških metala iz tečne faze, u prečišćavanju i dezinfekciji kontaminiranih voda. Matematički model, razvijen u okviru ove doktorske disertacije, može se koristiti za modelovanje procesa adsorpcije teških metala na karbonizovanim vlaknima konoplje. Takođe, niska cena i dobri rezultati dobijeni primenom novih ugljeničnih materijala na bazi aktiviranih vlakana konoplje kao sorbenta u predkoncentrisanju pesticida, čine ih adekvatnom zamenom za skupe komercijalne kertridže. Verifikacija rezultata je potvrđena i od strane međunarodne naučne javnosti, objavljivanjem u časopisima međunarodnog značaja iz domena ove problematike.

Ocena sposobnosti kandidata za samostalan naučni rad

Kandidat mr Marija Vukčević, dipl. ing. tehnologije je tokom izrade doktorske disertacije ispoljila izuzetnu stručnost u pripremi i realizaciji eksperimenata, korišćenju različitih tehnika karakterizacije materijala i analize rezultata. Kandidat poseduje sve kvalitete koji su neophodni za samostalni naučni rad.

4. OSTVARENI NAUČNI DOPRINOS

Prikaz ostvarenih naučnih doprinosa

U okviru ove doktorske disertacije ostvaren je značajan doprinos u razumevanju uticaja strukturnih karakteristika ugljeničnog prekursora, i parametara karbonizacije i aktivacije na ponašanje dobijenih materijala. Pružen je bolji uvid u sam proces aktivacije ugljeničnih materijala, i predložen mehanizam aktivacije u prisustvu KOH.

Doktorska disertacija daje značajan doprinos u razumevanju mehanizma adsorpcije iz tečne faze na čvrstim ugljeničnim sorbentima, objedinjujući i proširujući postojeća znanja o:

- mehanizmu spontanog izdvajanja srebra na površini ugljeničnih materijala,
- mehanizmu adsorpcije pesticida različitih hemijskih struktura i
- uticaju funkcionalizacije površine na površinske karakteristike i sorpcioni kapacitet ugljeničnih materijala.

Izborom optimalnih parametara proizvodnje i funkcionalizacije površine, dobijeni su jeftini ugljenični materijali koji se efikasno mogu koristiti:

- u procesu dezinfekcije i prečišćavanja vode zagađene organskim polutantima i teškim metalima, i

- kao sorbenti za predkoncentrisanje analita metodom ekstrakcije na čvrstoj fazi pri analizi pesticida iz vodenih rastvora.

Na osnovu izloženog može se zaključiti da je kandidat svojim rezultatima dao veliki naučni doprinos pre svega u oblasti proučavanja procesa adsorpcije i razvoja materijala željenih strukturnih i sorpcionih karakteristika.

Kritička analiza rezultata istraživanja

Istraživanja u okviru ove disertacije su koncipirana na osnovu definisanih ciljeva i detaljne analize literature iz oblasti dobijanja i modifikacije ugljeničnih materijala na bazi otpadnih materijala i bimase, kao i njihove primene za adsorpciju iz tečne faze. S obzirom na složenost problematike primenjeno je više metoda istraživanja. U okviru ove doktorske disertacije primenjena je metodologija istraživanja zastupljena u literaturi, ali su pri ispitivanju procesa aktivacije i ispitivanju uticaja strukture ugljeničnog prekursora na karakteristike ugljeničnog materijala, primenjene i neke originalne metode. Primenjena metodologija je omogućila da se dobiju relevantni podaci za objašnjenje mehanizma aktivacije, mehanizama sorpcije iz tečne faze, kao i uticaja parametara dobijanja i strukture ugljeničnog prekursora na karakteristike ugljeničnih materijala. Uvidom u dostupnu literaturu iz ove oblasti istraživanja i rezultate istraživanja dobijene u okviru ovoga rada, može se primetiti da dobijeni rezultati predstavljaju korak napred u ovoj oblasti. Posebno su značajni rezultati ispitivanja koji pokazuju da se ovi materijali mogu praktično primenjavati.

Očekivana primena rezultata u praksi

Rezultati dobijeni u ovom radu omogućili su uspostavljenje korelacije između strukture ugljeničnog prekursora i parametara dobijanja, i sorpcionim karakteristikama rezultujućih ugljeničnih materijala. Pružanjem boljeg uvida u uticaj hemijske modifikacije površine ugljeničnih materijala, na mehanizam sorpcije iz tečne faze, omogućeno je dizajniranje hemije površine u cilju postizanja maksimalne efikasnosti sorpcije. U okviru ove doktorske disertacije određeni su optimalni uslovi karbonizacije i aktivacije, čijom se implementacijom dobijaju ugljenični materijali jako razvijene specifične površine i poroznosti i željenih sorpcionih karakteristika. Ovako dobijeni materijali mogu se koristiti u proizvodnji filtera za dezinfekciju i prečišćavanje vode, zagađene organskim polutantima i teškim metalima, pri čemu se proces adsorpcije teških metala može modelovati matematičkim modelom, razvijenim u ovoj disertaciji. Podešavanjem hemije površine za maksimalnu sorpciju pesticida, dobijeni su jeftini sorbenti, koji su uspešno primenjeni za predkoncentrisanje pesticida u metodi ekstrakcije na čvrstoj fazi.

Prikazani rezultati se mogu primeniti i kao osnova za dalja istraživanja u domenu poboljšanja i dizajniranja karakteristika ugljeničnih materijala.

Verifikacija rezultata u časopisima i saopštenjima

Kandidat mr Marija Vukčević je svoje rezultate potvrdila objavljivanjem radova u časopisima međunarodnog značaja i saopštavanjem radova na međunarodnim i domaćim skupovima. Iz disertacije su proistekla dva rada objavljena u vrhunskim međunarodnim časopisima, i jedan rad objavljen u istaknutom međunarodnom časopisu i četiri rada objavljena u časopisu od međunarodnog značaja.

Rad u vrhunskom međunarodnom časopisu – M21

1. **Marija Vukcevic**, Ana Kalijadis, Marina Radisic, Biljana Pejic, Mirjana Kostic, Zoran Lausevic, Mila Lausevic, Application of carbonized hemp fibers as a new solid-phase extraction sorbent for analysis of pesticides in water samples, *Chemical Engineering Journal* 211-212 (2012) 224–232. (ISSN: 1385-8947, IF(2011) – 3.461)
2. Biljana M. Pejic, **Marija M. Vukcevic**, Ivana D. Pajic-Lijakovic, Mila D. Lausevic, Mirjana M. Kostic, Mathematical modeling of heavy metal ions (Cd^{2+} , Zn^{2+} and Pb^{2+}) biosorption by chemically modified short hemp fibers, *Chemical Engineering Journal* 172 (2011) 354– 360. (ISSN: 1385-8947, IF(2011) – 3.461)

Rad u istaknutom međunarodnom časopisu – M22

1. **M. Vukčević**, A. Kalijadis, S. Dimitrijević-Branković, Z. Laušević, M. Laušević, Surface characteristics and antibacterial activity of a silver-doped carbon monolith, *Science and Technology of Advanced Materials* 9 (2008) 015006 (7pp). [doi:10.1088/1468-6996/9/1/015006](https://doi.org/10.1088/1468-6996/9/1/015006) (ISSN: 1468-6996, IF(2008) – 1.267)

Rad u časopisu od međunarodnog značaja – M23

1. **M. Bačić-Vukčević**, A. Udovičić, Z. Laušević, A. Perić-Grujić, M. Laušević, "Surface Characteristics and Modification of Different Carbon Materials", *Materials Science Forum* 518 (2006) 217-222. (ISSN: 0255-5476, IF(2005) – 0.399)
2. Zoran M. Jovanović, Ana M. Kalijadis, **Marija M. Vukčević**, Zoran V. Laušević, Mila D. Laušević, Silver deposition on chemically treated carbon monolith, *Hemijska industrija* 63 (3) (2009) 195-200. (ISSN: 0367-598X, IF(2009) – 0.117) [doi:10.2298/HEMIND0903195J](https://doi.org/10.2298/HEMIND0903195J)
3. Ana M. Kalijadis, **Marija M. Vukčević**, Zoran M. Jovanović, Zoran V. Laušević, Mila D. Laušević, Characterization of surface oxygen groups on different carbon materials by the Boehm method and temperature programmed desorption, *Journal of the Serbian Chemical Society* 76 (5) (2011) 757-768. (ISSN: 0352-5139, IF(2011) – 0.879) [doi:10.2298/JSC091224056K](https://doi.org/10.2298/JSC091224056K)
4. **Marija Vukčević**, Ana Kalijadis, Zoran Jovanović, Zoran Laušević, Mila Laušević, Carbon Monolith Surface Chemistry Influence on the Silver Deposit Amount and Crystallite Size, *ACTA PHYSICA POLONICA A* 120 (2) (2011) 284-288. (ISSN: 0587-4246, IF(2011) – 0.444)

Saopštenje sa međunarodnog skupa štampano u izvodu – M34

1. A. Kalijadis, M. Vukčević, Z. Jovanović, Z. Laušević, M. Laušević, Silver deposition on the chemically surface treated carbon monolith, Tenth annual conference "YUCOMAT 2008", Herceg Novi, September 8-12, 2008., The Book of Abstracts, p.106
2. M. Vukčević, A. Kalijadis, Z. Jovanović, Z. Laušević, M. Laušević, The influence of chemical treatment of carbon monolith on silver deposition, Twelfth annual conference "YUCOMAT 2010", Herceg Novi, September 6-10, 2010., The Book of Abstracts, p.74
3. M. Vukčević, A. Kalijadis, B. Babić, M. Radišić, B. Pejić, Z. Laušević, M. Laušević, Surface characteristics of carbonized hemp fiber activated with potassium hydroxide, Thirteenth annual conference "YUCOMAT 2011", Herceg Novi, Montenegro, September 5-9, 2011., The Book of Abstracts, p.78.
4. M. Vukčević, M. Radišić, T. Vasiljević, A. Kalijadis, Z. Laušević, M. Laušević, Application of carbonized hemp fibers as a new solid-phase extraction sorbent for analysis of pesticides in water samples, 16th European Conference on Analytical Chemistry "Challenges in Modern Analytical Chemistry", 11-15 September 2011, Belgrade, Serbia, Section C, SP25
5. Marija Vukčević, Marina Radišić, Ana Kalijadis, Biljana Pejić, Zoran Laušević, Mila Laušević, Carbonization and activation of short hemp fibers for application in pesticide adsorption, Annual World Conference on Carbon – CARBON 2012, Krakow, Poland, June 17-22, 2012., Book of abstract (on CD), Abstract No. 613.

Saopštenje sa skupa nacionalnog značaja štampano u celini – M63

1. Marija Vukčević, Ana Kalijadis, Suzana Dimitrijević-Branković, Zoran Laušević, Mila Laušević, "Karbon monolit kao filter u prečišćavanju vode zagađene bakterijama", 5. simpozijum Hemija i zaštita životne sredine, 27-30. maj 2008., Tara, Knjiga izvoda, 212.
2. Marina Radišić, Marija Vukčević, Tatjana Vasiljević, Mila Laušević, "Određivanje pesticida u voćnim sokovima LC-MS² tehnikom", 5. simpozijum Hemija i zaštita životne sredine, 27-30. maj 2008., Tara, Knjiga izvoda, 46.
3. Marija Vukčević, Marina Radišić, Ana Kalijadis, Tatjana Vasiljević, Zoran Laušević, Mila Laušević, Adsorpcija pesticida na površini karbon monolita, 48. savetovanje Srpskog hemijskog društva, 17. i 18. april 2010., Novi Sad, Zbornik radova, 16-19.
4. Marija Vukčević, Marina Radišić, Ana Kalijadis, Biljana Babić, Biljana Pejić, Zoran Laušević, Mila Laušević, Adsorption of pesticides onto the carbonized short hemp fibers activated with potassium hydroxide, 49. savetovanje Srpskog hemijskog društva, 13. i 14. maj 2011., Kragujevac, Zbornik radova, 37-41.
5. Biljana Pejić, Marija Vukčević, Ivana Pajić-Lijaković, Mirjana Kostić, Jovana Milanović, Petar Škundrić, Biosorpcija jona Cd²⁺, Zn²⁺ i Pb²⁺ kratkim vlaknima konoplje: Matematički model, 49. savetovanje Srpskog hemijskog društva, 13. i 14. maj 2011., Kragujevac, Zbornik radova, 176-179

Saopštenje sa skupa nacionalnog značaja štampano u izvodu – M64

1. Marija Vukčević, Marina Radišić, Ana Kalijadis, Tatjana Vasiljević, Zoran Laušević, Mila Laušević, Adsorpcija pesticida na površini karbon monolita, 48. savetovanje Srpskog hemijskog društva, 17. i 18. april 2010., Novi Sad, Kratki izvodi radova, 29.

2. Marija Vukčević, Marina Radišić, Ana Kalijadis, Z. Laušević, Mila Laušević, Adsorpcija pesticida na površini karbon monolita aktiviranog kalijum-hidroksidom, IX Simpozijum "Savremene tehnologije i privredni razvoj", 21. i 22. oktobar 2011, Leskovac, Zbornik izvoda radova, 178

5. ZAKLJUČAK

Kratak osvrt na disertaciju u celini

Na osnovu svega napred iznetog Komisija smatra da doktorska disertacija mr Marije Vukčević, dipl.inž.tehnologije, pod nazivom „Uticaj morfologije i površinskih grupa nanoporoznih ugljeničnih materijala na adsorpciju pesticida iz vode“ predstavlja značajan, originalni naučni doprinos u oblasti Hemije i hemijske tehnologije, što je potvrđeno objavljivanjem radova u časopisima međunarodnog značaja i saopštenja na međunarodnim konferencijama.

Predlog Komisije Nastavno-naučnom veću

Imajući u vidu kvalitet, obim i naučni doprinos postignutih rezultata, Komisija predlaže Nastavno-naučnom veću TMF-a da prihvati ovaj Izveštaj i da ga zajedno sa podnetom doktorskom disertacijom mr Marije Vukčević da na uvid javnosti u zakonski predviđenom roku, kao i da, nakon završetka ove procedure, pozove kandidata na usmenu odbranu disertacije, pred Komisijom u istom sastavu.

U Beogradu, 19.11.2012.

ČLANOVI KOMISIJE

Dr Mila Laušević, red. prof.
Tehnološko-metalurški fakultet, Beograd

Dr Tatjana Vasiljević, van. prof.
Tehnološko-metalurški fakultet, Beograd

Dr Mirjana Kostić, van. prof.
Tehnološko-metalurški fakultet, Beograd

Dr Zoran Laušević, naučni savetnik
Institut za nuklearne nauke Vinča, Beograd