

NASTAVNO-NAUČNOM VEĆU
TEHNOLOŠKO-METALURŠKOG FAKULTETA
UNIVERZITETA U BEOGRADU

Predmet: Podobnost teme i kandidata Ivana M. Dugandžića za izradu doktorske disertacije

Na sednici Nastavno-naučnog veća Tehnološko-metalurškog fakulteta Univerziteta u Beogradu, održanoj 29.11.2012. godine, imenovani smo za članove Komisije za ocenu naučne zasnovanosti teme doktorske disertacije Ivana M. Dugandžića, dipl. inž. tehnologije, pod naslovom: „STRUKTURNE, MORFOLOŠKE I FUNKCIONALNE KARAKTERISTIKE HIBRIDNIH NANOČESTICA TITAN(IV)-OKSIDA DOBIJENIH METODOM NISKOTEMPERATURNE AEROSOL SINTEZE”.

Na osnovu materijala priloženog uz Zahtev kandidata, Komisija podnosi sledeći

I Z V E Š T A J

1. Podaci o kandidatu

1.1. Biografski podaci

Ivan M. Dugandžić rođen je 16.08.1981. godine u Beogradu, Republika Srbija. Diplomirao je 2009. godine na Tehnološko-metalurškom fakultetu Univerziteta u Beogradu, Odsek Hemijsko inženjerstvo, sa prosečnom ocenom 8,14 i 10 na diplomskom radu sa temom „Eksperimentalno određivanje i modelovanje viskoznosti binarnih sistema alkohola sa alkanima, acetonom i n-butil acetatom“. U periodu od juna 2006. do januara 2007. boravio je na studijskoj praksi u Antverpenu, Belgija (AGFA-Gevaert Group). Član je Srpskog hemijskog društva i Srpskog keramičkog društva.

1.2. Stečeno naučnoistraživačko iskustvo

Doktorske studije upisao je 2009. godine na Tehnološko-metalurškom fakultetu, Univerziteta u Beogradu, na odseku Hemijsko inženjerstvo, pod rukovodstvom mentora prof. dr Željka Grbavčića. U okviru doktorskih studija položio je sve predmete predviđene studijskim programom sa prosečnom ocenom 10.00, a završni ispit pod nazivom „Proučavanje parametara sinteze nanostrukturnih čestica titan(IV)-oksida metodom aerosol sinteze“ odbranio je 20.10.2012. godine sa ocenom 10, pred komisijom prof. dr Željko Grbavčić, prof. dr Srđan Pejanović i van. prof. dr Rada Pjanović. U Institutu tehničkih nauka SANU zaposlen je od 2009. godine kao istraživač pripravnik. Angažovan je 12 meseci na projektima Ministarstva prosvete, nauke i tehnološkog razvoja Republike Srbije i to na projektu osnovnih istraživanja OI 172035 „Racionalni dizajn i sinteza biološki aktivnih i koordinacionih jedinjenja i funkcionalnih materijala, relevantnih u (bio) nanotehnologiji“ i na projektu multidisciplinarnih istraživanja III 45020 „Materijali redukovane dimenzionalnosti za efikasnu apsorpciju svetlosti i konverziju energije“. Takođe, angažovan je i na istraživačko razvojnom projektu koji se realizuje između Instituta tehničkih nauka SANU i Narodne banke Srbije – Zavoda za izradu novčanica i kovanog

novca, Topčider. U zvanje istraživač saradnik izabran je 02.11.2012. Izradu doktorske teze realizuje u Institutu tehničkih nauka SANU pod neposrednim rukovodstvom dr Olivera Milošević, naučnog savetnika, a u saradnji sa Institutom „Vinča”, kao i univerzitetima: Karlos III-Madrid, Španija i Osaka, Japan.

Do sada je publikovao kao prvi autor jedan rad u časopisu od vrhunskog međunarodnog značaja i osam radova saopštenih na naučnim skupovima od međunarodnog značaja štampanih u izvodu, dok su dva rada u postupku evaluacije i objavljivanja u časopisima od vrhunskog međunarodnog značaja.

Položeni ispiti i ostvareni bodovi u toku doktorskih studija

	ESPB
1. Analogije fenomena prenosa	5
2. Hemijska kinetika	5
3. Odabrana poglavlja matematičke analize	5
4. Specijalna poglavlja prenosa mase	4
5. Viši kurs termodinamike	5
6. Višefazni sistemi	5
7. Metode karakterizacije keramičkih i staklastih materijala	4
8. Hemija fiziološki aktivnih jedinjenja	4
9. Fizika čvrstog stanja	4
10. Elektrodni materijali	5
11. Elektrohemijski i alternativni izvori električne energije	5
12. Završni ispit	30
	81

Spisak objavljenih radova i saopštenja sa konferencija:

Rad objavljen u vrhunskom međunarodnom časopisu (M21)

1. **Dugandžić I.M.**, Jovanović D.J., Mančić L.T., Zheng N., Ahrenkiel S.P., Milošević O.B., Šaponjić Z.V. & Nedeljković J.M., **2012**, Surface modification of submicronic TiO₂ particles prepared by ultrasonic spray pyrolysis for visible light absorption *Journal of Nanoparticle Research* 14 (10) 1157 (DOI: 10.1007/s11051-012-1157-1), **IF (2011)=3.287**
2. **Dugandžić I.M.**, Lojpur V., Mančić L., Dramićanin M.D., Rabanal M.E., Hashishin T., Tan Z., Ohara S. & Milošević O.B., **2013**, Aerosol-route as a feasible bottom-up chemical approach for up-converting phosphor particles processing, *Advanced Powder Technology*, 24 (5), *under revision*, **IF(2011)=1.612**
3. **Dugandžić I.M.**, Jovanović D.J., Mančić L.T., Milošević O.B., Ahrenkiel S.P., Šaponjić Z.V. & Nedeljković J.M., **2013**, Ultrasonic Spray Pyrolysis of Surface Modified TiO₂ Nanoparticles with Dopamine, *Nanotechnology*, *under revision* **IF(2011)=3.979**

Saopštenje sa međunarodnog skupa štampanog u izvodu (M34)

1. **Dugandžić I.M.**, Lojpur V.M., Mančić L.T., Rabanal M.E. & Milošević O.B., Dense spherical rare earth oxide particles synthesis *via* spray pyrolysis of polymeric precursor

- solution, YUCOMAT 2010, The Twelfth Annual Conference, Herceg Novi, Montenegro, **September 6-10, 2010**, The Book of Abstracts, **p. 92**
2. **Dugandžić I.M.**, Lojpur V.M., Mančić L.T., Rabanal M.E. & Milošević O.B., Nanophosphors synthesis through solvothermal route, ModTech 2011, International Conference in Modern Manufacturing Technologies, Chisinau, Republic of Moldavia, **May 25-27, 2010**, The Book of Abstracts, **p. 369**
 3. Mančić L.T., Marinković K.R., **Dugandžić I.M.**, Lojpur V.M. & Milošević O.B., Soft chemistry routes for synthesis of 3D and 1D nanostructures, 1st Conference of the Serbian Ceramic Society, Belgrade, Serbia, **March 17-18, 2011**, Program and the Book of Abstracts, **p. 45**
 4. **Dugandžić I.M.**, Jovanović D.J., Mančić L.T., Šaponjić Z.V., Nedeljković J.M. & Milošević O.B., Assembling and spheroidization of colloidal TiO₂ nanoparticles *via* aerosol route, SM-2011, The Ninth Students' Meeting, Novi Sad, Serbia, **November 16-18, 2011**, Programme and the Book of Abstracts, **p. 29**
 5. **Dugandžić I.M.**, Jovanović D.J., Mančić L.T., Šaponjić Z.V., Nedeljković J.M. & Milošević O.B., Aerosol-assisted low-temperature processing of colloidal TiO₂ nanoparticles: Two different manners for improving the optical properties, Tenth young researchers' conference materials science and engineering, Belgrade, Serbia, **December 21-23, 2011**, Program and the Book of Abstracts, **p. 29**
 6. **Dugandžić I.M.**, Jovanović D.J., Mančić L.T., Šaponjić Z.V., Nedeljković J.M. & Milošević O.B., Aerosol-assisted processing of dopamine-TiO₂ colloidal solution, **The First Serbian Ceramic Society Conference: Advanced Ceramic and Application I**, Belgrade, Serbia, **May 10-11, 2012**, Program and the Book of Abstracts, **p27**
 7. Mančić L.T., **Dugandžić I.M.**, Jovanović D.J., Šaponjić Z.V., Nedeljković J.M. & Milošević O.B., Surface modified TiO₂ particles obtained through aerosol processing of colloid, NANO 2012, XI International Conference on Nanostructured Materials, **August 26-31, 2012**, Program and the Book of Abstracts CD, **P-116**
 8. **Dugandžić I.M.**, Jovanović D.J., Mančić L.T., Šaponjić Z.V., Nedeljković J.M. & Milošević O.B., The optical properties of dopamine-TiO₂ submicronic sized particles, ICOM 2012, The 3rd International conference of the Physics of Optical Materials and Devices, **September 3-6, 2012**, Program and the Book of Abstracts, **p. 23**

1.3. Ocena podobnosti kandidata za rad na predloženoj temi

Na osnovu dosadašnjeg rada i pokazanih rezultata tokom doktorskih studija, kao i u okviru istraživačkog rada na projektima Ministarstva za nauku i tehnološki razvoj, odnosno Ministarstva prosvete, nauke i tehnološkog razvoja Republike Srbije, kao i učešća na razvojnom projektu, Komisija smatra da kandidat Ivan M. Dugandžić pokazuje veliku zainteresovanost i sposobnost za bavljenje naučnoistraživačkim i razvojnim radom. Neposredno u vezi sa istraživanjima predloženim u okviru ove doktorske disertacije kandidat ima jedan rad objavljen u vrhunskom međunarodnom časopisu (**M21**), osam radova saopštenih na skupovima od međunarodnog značaja štampanih u izvodu (**M34**), a dva rada se nalaze u postupku evaluacije i objavljivanja u vrhunskim međunarodnim časopisima kategorije (**M21**).

Na osnovu kratke izložene aktivnosti kandidata, Komisija smatra da kandidat Ivan M. Dugandžić poseduje potrebnu zrelost, kreativnost i kompeticiju koja je neophodna za izrazito

pozitivnu ocenu njegove podobnosti, te može sa uspehom da realizuje sva predviđena istraživanja i pruži konkretne odgovore i objašnjenja u okviru predložene doktorske disertacije.

2. Predmet i cilj istraživanja

Istraživanja predviđena u okviru ove doktorske disertacije imaju za cilj *in situ* sintezu hibridnih nanočestica titanijum(IV)-oksida, sa unapred definisanim strukturnim, morfološkim i funkcionalnim karakteristikama primenom metode niskotemperaturne aerosol sinteze, sa mogućnošću primene u savremenim fotokatalitičkim procesima.

U sklopu predmeta istraživanja, očekuje se da je kontrolu strukturnih i morfoloških karakteristika čestica moguće ostvariti primenom inovativne metode sinteze reakcijama u disperznom sistemu-aerosolu izvođenjem sinteze iz koloidnog prekursorskog rastvora nanočestica i uz odgovarajuću optimizaciju relevantnih parametara procesa, pre svega temperature i vremena zadržavanja, a sa ciljem dobijanja monodisperznih sferičnih čestica na bazi titanijum(IV)-oksida, koje imaju jasno izdiferenciranu strukturnu hijerarhiju, veliki odnos površine prema zapremini, da su u neaglomerisanom stanju i sa razvijenom funkcionalnom površinom.

Jedan od ciljeva doktorske disertacije je funkcionalizacija površine modifikacijom čestica donorskim organskim ligandima, što će imati za posledicu formiranje hibridnih čestica, tj. kompleksa oksid-ligand, promenu strukturne koordinacije površinskih atoma titanijum(IV)-oksida, promenu elektronske strukture titanijum(IV)-oksida, odnosno, pomeranje praga apsorpcije u vidljivi deo spektra.

Predložena istraživanja, takođe imaju za cilj definisanje i objašnjenje mehanizama nastajanja čestica u disperznom sistemu - aerosolu u procesu nukleacije, rasta i agregacije primarnih nanočestica, a koji se odigravaju na granici faza tečno/gas, kao i uspostavljanje korelacije između karakteristika finalnih čestica i uslova sinteze primenom savremenih metoda karakterizacije, kao što su skenirajuća elektronska mikroskopija (FE-SEM), analitička i visokorezoluciona transmisiona elektronska mikroskopija (TEM/HR-TEM) u kombinaciji sa nanotomografijom, elektronskom difrakcijom selektovane površine (SEAD) i energetsom disperzionom analizom x-zraka (EDAX), skenirajućom tunelskom elektronskom mikroskopijom (STEM), rentgenostrukturnom analizom (XRD) itd.

Do sada je pokazano da su osnovni parametri koji utiču na formiranje čestice fizičko-hemijske karakteristike prekursora, tehnika formiranja aerosola i procesno promenljive veličine (temperatura, vreme zadržavanja, atmosfera itd.), odnosno, transportne karakteristike aerosola u reakcionoj zoni, a koji determinišu mehanizme formiranja kapi aerosola, precipitaciju čvrste komponente, nukleaciju, rast i agregaciju primarnih nano čestica u tzv. sekundarnu sferičnu česticu i njihov uticaj na formiranje određene morfologije finalnih čestica. S tim u vezi, a sa ciljem predviđanja veličine i morfologije čestice, biće posebno analizirane transportne karakteristike aerosola i razvijan model isparavanja kapi pod pretpostavkom da se određena morfologija čestica formira u fazi isparavanja/sušenja, u odsustvu koalescencije kapi kroz mehanizam jedna kap - jedna čestica.

Metoda aerosol sinteze ima izuzetnu primenu u istraživanjima iz oblasti nanotehnologija i nanostrukturnih materijala, pre svega, kao metoda sinteze kojom je moguće ostvariti kontrolu nad strukturnim i morfološkim karakteristikama čestica.^[1] Pokazano je da, se u osnovi, metoda bazira na sledećim fazama procesa: formiranju diskretnih kapi aerosola na bazi polaznih rastvora prekursora željene stehiometrije, konverziji kapi u čestice tokom transporta u kontinualnoj fazi

gasa kroz sukcesivne faze tokom procesa isparavanja, sušenja i precipitacije, alternativno, hemijske reakcije, koji se odigravaju na nivou kapi veličine nekoliko mikrometara i u disperznom sistemu.^[2] Ustanovljeno je da ključne faktore u kontroli morfologije, veličine i raspodele čestica predstavljaju izbor prekursorskog rastvora, koji može biti u vidu pravih ili koloidnih rastvora, emulzija itd., način atomizacije (dvo-fluidna, ultrazvučna itd.), transportne karakteristike aerosola, temperatura i vreme zadržavanja, reakciona atmosfera i pritisak,^[3-8] te s tim u vezi nameće se potreba za uspostavljanjem jasne korelacije između procesnih parametara i morfoloških i strukturnih svojstava rezultujućih čestica, što nameće potrebu za uspostavljanjem određenih matematičkih modela koji će uzeti u razmatranje sve relevantne parametre procesa.^{[9-}

^{12]} U trenutnom stadijumu razvoja metode, proces sinteze se posmatra sa stanovišta racionalnog dizajna čestica sa unapred definisanom veličinom i raspodelom čestica, strukturnom hijerarhijom i funkcionalnim karakteristikama, koje, kao takve, imaju značajnu ulogu u savremenim fotokatalitičkim materijalima,^[13] sa mogućnošću primene u solarnim ćelijama.^[14]

Jedan od materijala, koji se najčešće proučava u oblasti savremenih fotokatalitičkih materijala je titanijum(IV)-oksid (TiO_2), zbog svoje hemijske i biološke inertnosti, termičke stabilnosti, netoksičnosti i široke rasprostranjenosti u prirodi.^[15,16] Sa ciljem proučavanja uticaja faznog sastava na fotokatalitička svojstva ovog materijala, do sada su u naučnoj literaturi najviše proučavane tri osnovne kristalografske faze TiO_2 : niskotemperaturna faza, anatas, i visokotemperaturna stabilna faza, rutil, koje se mogu opisati tetragonalnom strukturom, i brukit, sa romboedarskom strukturom. Pored navedenih svojstava, TiO_2 je poluprovodni materijal sa širokim energetskeg procepmom (3.2 eV i 3.0 eV za kristalne modifikacije anatasa, odnosno, rutila), što predstavlja značajnu prepreku fotokatalitičkim procesima, jer se samo mali deo svetlosti apsorbuje zbog širokog energetskeg procepa, i nameće potrebu pomeranja praga apsorpcije ka vidljivom delu spektra.^[17] U dosadašnjim istraživanjima vezanim za rešavanje ove problematike zapaža se nekoliko pristupa, kao što su: modifikacija strukture dopiranjem jonima metala i nemetala (C, N, S...), nanočesticama poluprovodnika prelaznih metala, kao i organometalnim kompleksima.^[18] Poseban pravac u navedenim istraživanjima predstavlja modifikacija strukture koloidnih nanokristalita TiO_2 bidentatnim ligandima.^[19] Pokazano je da u opsegu veličine čestica nanokristalita ≤ 20 nm, usled velike zakrivljenosti površine sferičnih čestica, atomi titana menjaju svoje strukturno okruženje postajući veoma reaktivni centri.^[20] Naime, u okviru dosadašnjih istraživanja površinske modifikacije koloidnih čestica titan dioksida, metodama analize strukture površinskih atoma titana (XANES, X-ray Absorption Near Edge Structure i XAFS, X-ray Absorption of Fine Structure), pokazano je da površinski atomi titana menjaju koordinaciju iz oktaedarske (šest koordinata) u skver-piramidalnu (pet koordinata). U prisustvu jednostavnih organskih molekula, koji poseduju barem jednu hidroksilnu grupu, dolazi do formiranja hemijske veze na ovim reaktivnim centrima, pri čemu se atomi titana, koji su promenili svoje strukturno okruženje, vraćaju u svoje prvobitno strukturno (koordinaciono) uređenje. To ima za posledicu prenos naelektrisanja usled apsorpcije svetlosti, pa se elektron iz liganda prenosi direktno u provodnu zonu titan(IV)-oksida. Formiranje ovakvog kompleksa dovodi do pomeranja fundamentalnog praga apsorpcije titanijum(IV)-oksida (~3.2 eV) duboko ka vidljivom delu spektra, odnosno, promenu elektronske strukture.^[19-21] Detaljnim pregledom literature ustanovljeno je da je modifikacija strukture bidentatnim ligandima ostvarena samo na koloidnim česticama, te je od interesa istraživanje modifikacije submikronskih čestica sa strukturnom hijerarhijom, nastalih u procesu nukleacije, rasta i kolizije, u odsustvu koalescencije primarnih nano čestica, tokom procesa niskotemperaturne aerosol sinteze.

Reference:

- [1] **(a)** Kodas T.T. and Hampend-Smith M.: Aerosol processing of materials, Wiley-VCH, New York, 1999; **(b)** Messing, Gary L., Zhang, Shi-Chang, Jayanthi, Gopal V. Ceramic powder synthesis by spray pyrolysis (1993) Journal of the American Ceramic Society, 76 (11), pp. 2707-2726 **(c)** Okuyama, K., Lenggoro, I.W. Preparation of nanoparticles via spray route (2003) Chemical Engineering Science, 58 (3-6), pp. 537-547
- [2] Milosevic, O., Mantic, L., Rabanal, M.E., Gomez, L.S., Marinkovic, K. Aerosol route in processing of nanostructured functional materials (2009) Kona Powder and Particle Journal, 27, pp. 84-106
- [3] **(a)** Rajan, R., Pandit, A.B. Correlations to predict droplet size in ultrasonic atomisation (2001) Ultrasonics, 39 (4), pp. 235-255 **(b)** Bang, J.H., Suslick, K.S. Applications of ultrasound to the synthesis of nanostructured materials (2010) Advanced Materials, 22 (10), pp. 1039-1059
- [4] Song, S.A., Jung, K.Y., Park, S.B. Preparation of Y₂O₃ particles by flame spray pyrolysis with emulsion (2009) Langmuir, 25 (6), pp. 3402-3406
- [5] Mantic, L., Lojpur, V., Barosso, I., Rabanal, M.E., Milosevic, O. Synthesis of cerium-activated yttrium aluminate based fine phosphors by an aerosol route (2012) European Journal of Inorganic Chemistry, (16), pp. 2716-2724
- [6] Xia, B., Lenggoro, I.W., Okuyama, K. Novel route to nanoparticle synthesis by salt-assisted aerosol decomposition (2001) Advanced Materials, 13 (20), pp. 1579-1582
- [7] Suh, W.H., Jang, A.R., Suh, Y.-H., Suslick, K.S. Porous, hollow, and ball-in-ball metal oxide microspheres: preparation, endocytosis, and cytotoxicity (2006) Advanced Materials, 18 (14), pp. 1832-1837
- [8] Widiyastuti, W., Balgis, R., Iskandar, F., Okuyama, K. Nanoparticle formation in spray pyrolysis under low-pressure conditions (2010) Chemical Engineering Science, 65 (5), pp. 1846-1854
- [9] Milošević, O., Gagić, V., Vodnik, J., Mitrović, A., Karanović, L., Stojanović, B., Živković, L. Synthesis and deposition of ZnO based particles by aerosol spray pyrolysis (1997) Thin Solid Films, 296 (1-2), pp. 44-48
- [10] Stopić, S., Friedrich, B., Volkov-Husovic, T., Raić, K. Mechanism and kinetics of nanosilver formation by ultrasonic spray pyrolysis progress report after successful up-scaling (Part 2) (2011) Metall, 65 (4), pp. 147-150
- [11] Grbavčić, Ž.B., Garić, R.V., Vuković, D.V., Hadžismajlović, D.E., Littman, H., Morgan III, M.H., Jovanović, S.Dj. Hydrodynamic modeling of vertical liquid-solids flow (1992) Powder Technology, 72 (2), pp. 183-191
- [12] **(a)** Lenggoro, I.W., Hata, T., Iskandar, F., Lunden, M.M., Okuyama, K. An experimental and modeling investigation of particle production by spray pyrolysis using a laminar flow aerosol reactor (2000) Journal of Materials Research, 15 (3), pp. 733-743 **(b)** Wang, W.-N., Purwanto, A., Lenggoro, I.W., Okuyama, K., Chang, H., Jang, H.D. Investigation on the correlations between droplet and particle size distribution in ultrasonic spray pyrolysis (2008) Industrial and Engineering Chemistry Research, 47 (5), pp. 1650-1659
- [13] Liu, B., Nakata, K., Sakai, M., Saito, H., Ochiai, T., Murakami, T., Takagi, K., Fujishima, A. Hierarchical TiO₂ spherical nanostructures with tunable pore size, pore volume, and specific surface area: Facile preparation and high-photocatalytic performance (2012) Catalysis Science and Technology, 2 (9), pp. 1933-1939
- [14] **(a)** Grätzel, M. Recent advances in sensitized mesoscopic solar cells (2009) Accounts of Chemical Research, 42 (11), pp. 1788-1798 **(b)** Zhang, Q., Myers, D., Lan, J., Jenekhe, S.A., Cao, G. Applications

of light scattering in dye-sensitized solar cells (2012) *Physical Chemistry Chemical Physics*, 14 (43), pp. 14982-14998

- [15] Fujishima, A., Zhang, X., Tryk, D.A. *TiO₂ photocatalysis and related surface phenomena* (2008) *Surface Science Reports*, 63 (12), pp. 515-582
- [16] Diebold, U. *The surface science of titanium dioxide* (2003) *Surface Science Reports*, 48 (5-8), pp. 53-229
- [17] Linsebigler, A.L., Lu, G., Yates Jr., J.T. *Photocatalysis on TiO₂ surfaces: Principles, mechanisms, and selected results* (1995) *Chemical Reviews*, 95 (3), pp. 735-758
- [18] Chen, X., Mao, S.S. *Titanium dioxide nanomaterials: Synthesis, properties, modifications and applications* (2007) *Chemical Reviews*, 107 (7), pp. 2891-2959
- [19] Janković, I.A., Šaponjić, Z.V., Čomor, M.I., Nedeljkovic, J.M. *Surface modification of colloidal TiO₂ nanoparticles with bidentate benzene derivatives* (2009) *Journal of Physical Chemistry C*, 113 (29), pp. 12645-12652
- [20] Rajh, T., Nedeljkovic, J.M., Chen, L.X., Poluektov, O., Thurnauer, M.C. *Improving optical and charge separation properties of nanocrystalline TiO₂ by surface modification with vitamin C* (1999) *Journal of Physical Chemistry B*, 103 (18), pp. 3515-3519
- [21] Rajh, T., Chen, L.X., Lukas, K., Liu, T., Thurnauer, M.C., Tiede, D.M. *Surface restructuring of nanoparticles: An efficient route for ligand-metal oxide crosstalk* (2002) *Journal of Physical Chemistry B*, 106 (41), pp. 10543-10552

3. Polazne hipoteze

Jedna od polaznih hipoteza u izradi ove doktorske disertacije oslanja se na rezultate dosadašnjih istraživanja vezanih za formiranje određene strukturne hijerarhije u velikom broju ispitivanih sistema dobijenih metodom aerosol sinteze, odnosno, na pretpostavku da se u uslovima nisko temperaturne aerosol sinteze, na kojima su kapi aerosola podvrgnute samo procesima isparavanja - sušenja tokom konverzije kapi u čestice, čestice formiraju u procesu nukleacije, rasta i kolizije primarnih nano čestica, pri čemu ne dolazi do njihove koalescencije, odnosno, ukрупnjavanja. Upravljanje procesom na ovaj način, polazeći iz koloidnog rastvora nanočestica, uz odgovarajuću kontrolu parametara sinteze, pre svih temperature i vremena zadržavanja, imaće za rezultat formiranje tzv. sekundarnih submikronskih čestica, čija veličina i raspodela veličina direktno zavisi od parametara rastvora i uslova atomizacije, a koje će predstavljati meke agregate - asemble primarnih nanočestica u odsustvu sinterovanja. Očekuje se da ovako formirane hijerarhijski organizovane sekundarne čestice, sastavljene od agregata primarnih nanočestica, imaju veliku specifičnu površinu, odnosno, veliki odnos površine prema zapremini. Takođe, pretpostavlja se da su u ovako formiranoj hijerarhijskoj strukturi, zadržana strukturna svojstva i funkcionalnost primarnih nanočestica koloida. Sa porastom temperature procesa, očekuje se rast primarnih nanočestica i njihova koalescencija, uz odgovarajuću promenu faznog sastava, što će takođe biti praćeno u okviru ove doktorske disertacije izvođenjem procesa u širokom opsegu temperatura. Druga pretpostavka, koja će takođe biti proveravana tokom izrade ove teze jeste da se u uslovima sinteze na niskim temperatura u sistemu zadržava faza anatasa, čija se transformacija u rutil očekuje na temperaturama preko 600 °C.

Kontrola nad strukturnim i morfološkim karakteristikama čestica i posebno definisanje egzaktna korelacije veličine kapi/čestice sa parametrima procesa, zahteva uspostavljanje i korišćenje matematičkih modela, odnosno, postavljanje seta diferencijalnih jednačina koje opisuju simultani prenos toplote i mase pri laminarnom režimu opstrujavanja sfere. Pri tome se polazi od pretpostavke da do formiranja čestica dolazi u procesu koji se odigrava u toku dve

faze: prve faze, u kojoj dolazi do isparavanja sa površine kapi uz značajan pad vrednosti prečnika kapi, i druge faze, sušenja i formiranja čvrste čestice krajnjeg prečnika dispergovane u struji nosećeg gasa.

Bitna pretpostavka, koja determiniše istraživanja predviđena u ovoj doktorskoj disertaciji, bazira se na činjenici da kod nanočestica dimenzija ≤ 20 nm, usled velike zakrivljenosti površine, površinski atomi titana menjaju koordinaciju iz oktaedarske (šest koordinata) u skverpiramidalnu (pet koordinata), što utiče na povećanu reaktivnost nanočestica. Vezivanjem jednostavnih organskih molekula, dolazi do formiranja hemijske veze na ovim reaktivnim centrima, prenosa naelektrisanja i pomeranja praga apsorpcije titanijum(IV)-oksida ka vidljivom delu spektra, odnosno, promene elektronske strukture. Uz prethodno obrazloženu pretpostavku o formiranju strukturno-hijerarhijskih čestica, sastavljenih od primarnih nano čestica, od posebnog interesa je istraživanje mogućnosti površinske modifikacije sekundarnih submikronskih čestica, posebno sa aspekta njihove potencijalne primene u fotokatalitičkim procesima i solarnim ćelijama, te će ova pretpostavka biti proverena adsorpcijom različitim organskih liganada, uz praćenje apsorpcije svetlosti, formiranja hibridnih oksid-organski ligand struktura, praćenja prenosa naelektrisanja i elektronske strukture Ti(IV)-oksida. Očekuje se da će ovako formirani hibridni prahovi TiO_2 sa modifikovanom strukturom bidentatnim organskim ligandima, sintetizovani metodom aerosol sinteze, dovesti do pomeranja praga apsorpcije duboko u vidljivu oblast u poređenju sa nemodifikovanim prahovima.

Sinteza hibridnih čestica sa ovakvom strukturnom hijerarhijom može imati praktičnu primenu u savremenim uređajima za konverziju solarne energije u električnu, poznatijim kao fotonaponski uređajim. Za postizanje visoke efikasnosti ovakve vrste uređaja neophodno je postojanje čestica određene strukture, morfologije i veličine, tzv. „optimalnih čestica“ koje treba da omoguće što veći broj mesta za adsorpciju i što veće rasejanje upadne svetlosti. Ukoliko su čestice male, moguće je adsorbovati veliki broj molekula modifikatora, ali nije moguće postići efikasno rasejanje. Sa druge strane, velike čestice, čije su dimenzije uporedive sa talasnom dužinom upadne svetlosti, ostvaruju efikasno rasejanje svetlosti, ali se ne može omogućiti veliki broj mesta za adsorpciju modifikatora. Pretpostavlja se da između ove dve krajnosti upravo čestice submikronske veličine sa definisanom „strukturnom hijerarhijom“ omogućavaju postojanje maksimalnog mogućeg broja aktivnih mesta za adsorpciju i efikasno rasejanje upadne svetlosti, i to baš zbog svojih submikronskih dimenzija. Navedene činjenice da su pomoću metode aerosol sinteze do sada ostvareni značajni rezultatu u pravcu kontrole nad strukturnim i morfološkim karakteristikama čestica, kao i da se modifikacijom površine koloidnih nano-čestica titanijum(IV)-oksida može postići efikasnija apsorpcija, predstavljaju osnov za sintezu hibridnih čestica sferičnog oblika, submikronske veličine, sa uskom raspodelom veličine čestica kao i jedinstvenim svojstvima koja su do sada zapažena samo kod nanočestica veličine ≤ 20 nm. Dobijene čestice svojim svojstvima pripadale bi najsavremenim klasi fotokatalitičkih materijala sa mogućnošću primene u solarnim ćelijama.

4. Naučne metode istraživanja

Da bi se ostvarili gornji ciljevi i naučna predviđanja, metodologija sinteze hibridnih nanočestica na bazi titanijum(IV) oksida, sa hijerarhijskom strukturom i kontrolisanom funkcionalnom površinom, koncipirana je na sledeći način:

- Sinteza i karakterizacija koloidnog prekursorskog titanijum(IV)-oksida;

- Određivanje fizičko-hemijskih karakteristika prekursorskih rastvora (koncentracija, viskozitet, gustina itd.);
- Kontrolisana sinteza i karakterizacija hibridnih nanočestica na bazi titanijum(IV) oksida, sa hijerarhijskom strukturom u procesu niskotemperaturne aerosol sinteze;
- Uspostavljanje egzaktnih korelacija veličine kapi/čestice sa parametrima procesa;
- Funkcionalizacija površine, odnosno, formiranje hibridnih čestica na bazi titanijum(IV)-oksida adsorpcijom organskim ligandima i određivanje funkcionalnih karakteristika.

S tim u vezi, u okviru ove doktorske disertacije planirana je primena savremenih metoda za sintezu i karakterizaciju nemodifikovanih i modifikovanih prekursorskih rastvora, savremenih metoda za karakterizaciju rezultujućih prahova, kao i savremenih spektroskopskih metoda za praćenje funkcionalnih karakteristika hibridnih čestica.

Metode sinteze, primenjene u okviru ove teze, pripadaju grupi hemijskih sinteza i, posebno, inovativnih nanotehnologija. Metoda koja će biti korišćena za dobijanje prekursorskih nemodifikovanih ili modifikovanih rastvora bazira se na principima koloidne hemije i kontrolisanoj hidrolizi soli titana, dok će sinteza hibridnih nanočestica na bazi titanijum(IV) oksida, sa hijerarhijskom strukturom biti realizovana u procesu niskotemperaturne aerosol sinteze.

Za određivanje fizičko-hemijskih karakteristika prekursorskih rastvora koloidnih nanočestica, kao što su površinski napon, viskozitet i gustina, koristiće se metoda prstena i modifikovana Cuetteova metoda, respektivno. Planirano je da morfologija i stepen kristaliničnosti koloidnih nanočestica u prekursorском rastvoru, budu ispitani metodama rendgenske difrakcije (XRD) i transmisije elektronske mikroskopije (TEM). Optičke karakteristike prekursorskih rastvora biće analizirane metodom ultra-violetne vidljive spektrofotometrije (UV-Vis). Stehiometrijski sastav i odnos molekula odabranog modifikatora i površinskih atoma titana biće određeni primenom Jobove metode (metoda kontinualnih varijacija).

Strukturna i morfološka karakterizacija prahova dobijenih metodom aerosol sinteze iz prekursorskih rastvora nemodifikovanih i modifikovanih nanočestica, planirana je primenom metoda rendgenske difrakcije (XRD), konvencionalne/visokorezolucione skenirajuće mikroskopije (SEM/FESEM), kao i analitičke i visoko rezolucione transmisije elektronske mikroskopije (TEM/HRTEM), u kombinaciji sa nanotomografijom, elektronskom difrakcijom selektovane površine (SEAD) i energetsom disperzionom analizom x-zraka (EDAX). Mikrostrukturalna analiza ispitivanih uzoraka praha biće izvedena utačnjavanjem strukturnog modela primenom Ritveldove metode pomoću kompjuterskog programa Topas. Raspodela veličine čestica dobijenih prahova biće određena primenom uređaja za određivanje raspodele veličine čestica difrakcijom laserskog snopa (LPS). Rezultati će biti prikazani histogramima frakcije i kumulativne raspodele. Dobijeni rezultati biće analizirani sa stanovišta srednjeg prečnika čestica i različitih statističkih kriterijuma uniformnosti raspodele (centralna tendencija, odstupanje i asimetrija). Takođe, planirana je provera saglasnosti sa raspodelom veličine čestica dobijenih analizom mikrografija skenirajuće elektronske mikroskopije softverskim paketom Image J. Optičke karakteristike prahova biće ispitane primenom metode difuziono refleksione spektroskopije (DRS), a vrednosti širine energetske zabranjene zone biće procenjene primenom Kubelka-Munk metode. Priroda veze, optimalna struktura između površinskih atoma titana i površinskih modifikatora, neophodna za formiranje kompleksa transfera naelektrisanja (CT),

biće ispitana primenom metode infracrvene spektroskopije sa Furijeovom transformacijom (FT-IR).

Kontrola nad strukturnim i morfološkim karakteristikama čestica i, posebno, definisanje egzaktno korelacije veličine kapi/čestice sa parametrima procesa, baziraće se na materijalnim bilansima za prenos količine toplote i mase, odnosno, postavljanju seta diferencijalnih jednačina koje opisuju simultani prenos toplote i mase pri laminarnom režimu opstrujavanja sfere.

5. Očekivani naučni doprinos

- Očekuje se da će rezultati predložene doktorske disertacije i primenjena metodologija izrade, doprineti razvoju inovativnih metoda sinteze nanostrukturnih materijala, čime se značajno unapređuje naučna oblast nanotehnologije i nanomaterijala.
- Takođe, očekuje se da će rezultati ove doktorske teze doprineti boljem razumevanju složenog mehanizma konverzije kapi u čestice, koja se odigrava u disperznom sistemu simultanim fenomenima prenosa mase, toplote i količine kretanja, čime se ostvaruje značajan doprinos u oblasti hemijskog inženjerstva. Zahvaljujući činjenici da se postupak sinteze izvodi u toku kontinualnog procesa, u odsustvu visoke temperature, pritiska, i uz mogućnost kontrole velikog broja parametara procesa, očekuje se da je moguće sintezu preneti na proces uvećanih razmera, koji bi pritom ispunjavao sve uslove principa zaštite životne sredine.
- Pored navedenih doprinosa, od rezultata predloženih istraživanja u okviru ove disertacije očekuje se da daju originalni i fundamentalni doprinos u istraživanjima iz oblasti površinske modifikacije titanijum(IV)-oksida bidentatnim ligandima.
- Od dobijenih rezultata očekuje se poseban doprinos, kako u oblasti fundamentalnih istraživanja, tako i sa aspekta praktične primene hibridnih čestica hijerarhijske strukture titanijum(IV)-oksida u fotonaponskim uređajima, pre svih solarnim ćelijama, što će takođe biti značajan doprinos u oblasti zaštite životne sredine.
- Činjenica da se primenom ove metode dobija prah visokog procenta čistoće i velike specifične površine, daje dobru polaznu osnovu za dalji nastavak istraživanja u oblasti katalitičkih materijala, posebno u slučaju sinteze prahova metalnih oksida sa modifikovanim hemijskim i elektrohemijskim karakteristikama.
- Od dobijenih rezultata očekuje se da budu vrednovani u međunarodnim časopisima koji su relevantni za oblast istraživanja i saopštavani na skupovima od nacionalnog i međunarodnog značaja.

6. Plan istraživanja i struktura rada

U prvoj fazi izrade doktorske disertacije u okviru predviđenih istraživanja planirana je sinteza prekursorskog rastvora koloidnih nanočestica TiO_2 dispergovanih u vodi, kao i hijerarhijsko organizovanih čestica prahova na bazi ovih prekursora metodom niskotemperaturne aerosol sinteze. Sintaza prekursorskih rastvora biće izvedena metodom kontrolisane hidrolize soli titana u skladu sa ranije uspostavljenom procedurom. Sintaza prahova na bazi Ti(IV) oksida biće izvedena na laboratorijskom postrojenju za ultrazvučnu sprej pirolizu. Atomizacija prekursorskog rastvora koloidnih TiO_2 nanočestica, predviđena je primenom ultrazvučnog atomizera sa tri piezoelektrična pretvarača, radne frekvence 1.3 MHz. Primenom tehnike ultrazvučne atomizacije očekuju se kapi aerosola srednje veličine $\sim 3 \mu\text{m}$, koje će potom biti

transportovane strujom inertnog nosećeg gasa, kao kontinualne faze disperznog sistema, u visokotemperaturni protočni cevni reaktor. Parametri procesa, tokom konverzije kapi u česticu-zapreminski protok i temperatura, biće definisani na osnovu planiranog vremena zadržavanja kapi u zoni sa određenim temperaturnim gradijentom uspostavljenim u reaktoru, kao i geometrije samog reaktora. Temperaturni profil u reaktoru biće unapred definisan u okviru tri nezavisno kontrolisane temperaturne zone. U cilju pronalaženja optimalnih uslova sinteze, temperature i vremena zadržavanja, planirane su sinteze prahova na različitim temperaturama od 150, 300, 500 i 800 °C. Za izdvajanje čestica iz gasnog toka koristiće se elektrostatički precipitator.

U cilju uspostavljanja korelacije između metode sinteze i rezultujućih karakteristika prahova, odnosno, proučavanju optimalnih parametara procesa za dobijanje zahtevane strukture i morfologije čestica, u ovom segmentu rada planirana je fizičko-hemijska, kao i strukturna i morfološka karakterizacija dobijenih prekursorskih rastvora i rezultujućih prahova.

Za određivanje fizičko-hemijskih karakteristika prekursorskih rastvora koloidnih nanočestica, kao što su površinski napon, viskozitet i gustina, koristiće se metoda prstena i modifikovana Cuetteova metoda, respektivno. Planirano je da morfologija i stepen kristaliničnosti koloidnog prekursorskog rastvora, budu ispitani metodama rendgenske difrakcije (XRD) i transmisije elektronske mikroskopije (TEM). Optičke karakteristike prekursorskih rastvora biće analizirane metodom ultra-violetne vidljive spektrofotometrije (UV-Vis). Stehiometrijski sastav i odnos molekula odabranog modifikatora i površinskih atoma titana biće određeni primenom Jobove metode (metoda kontinulanih varijacija).

Strukturna i morfološka karakterizacija prahova, dobijenih metodom aerosol sinteze iz prekursorskih rastvora nemodifikovanih i modifikovanih nanočestica, planirana je primenom metoda rendgenske difrakcije (XRD), konvencionalne/visokorezolucione skenirajuće mikroskopije (SEM/FESEM), kao i analitičke i visokorezolucione transmisije elektronske mikroskopije (TEM/HRTEM), u kombinaciji sa nanotomografijom, elektronskom difrakcijom selektovane površine (SEAD) i energetskom disperzionom analizom x-zraka (EDAX). Mikrostrukturalna analiza ispitivanih uzoraka praha biće izvedena utačnjavanjem strukturnog modela primenom Ritveldove metode pomoću kompjuterskog programa Topas. Raspodela veličine čestica dobijenih prahova biće određena primenom uređaja za određivanje raspodele veličine čestica difrakcijom laserskog snopa (LPS). Rezultati će biti prikazani histogramima frakcije i kumulativne raspodele. Dobijeni rezultati biće analizirani sa stanovišta srednjeg prečnika čestica i različitih statističkih kriterijuma uniformnosti raspodele (centralna tendencija, odstupanje i asimetrija). Takođe, planirana je provera saglasnosti sa raspodelom veličine čestica dobijenih analizom mikrografija skenirajuće elektronske mikroskopije softverskim paketom Image J. U okviru ove faze, planirano je ispitivanje zavisnosti uticaja temperature i vremena zadržavanja na strukturne, mikrostrukturne i morfološke karakteristike dobijenih prahova. U zavisnosti od rezultata analize, planirana je optička karakterizacija praha sa najoptimalnijim karakteristikama sa aspekta mogućnosti funkcionalizacije površine. U nastavku ovog dela istraživanja planirano je da prah najoptimalnijih karakteristika, sa aspekta mogućnosti funkcionalizacije površine dobijen metodom aerosol sinteze iz prekursorskog rastvora nanočestica strukture TiO_2 , bude modifikovan sledećim ligandima: vitaminom C (L-askorbinska kiselina), kateholom (benzen-1,2 diol), dopaminom (4-(2-etilamin)-benzen diol), 2,3-dihidroksi naftalenom (naftalen-2,3 diol) i antrarobinom (antracen 1,2,10-triol), nakon čega će biti izvođena optička karakterizacija modifikovanih prahova. Osim toga, planirano je i ispitivanje strukture hibridnih čestica ostvarenih između različitih bidentatnih liganada i površinskih atoma titana.

Dobijeni rezultati optičke i strukturne karakterizacije biće upoređeni sa podacima o površinskoj modifikaciji strukture nanočestica TiO_2 dostupnim u naučnoj literaturi.

U narednoj fazi istraživanja sprovedenih u okviru ove disertacije, planirana je sinteza i karakterizacija prahova polazeći od prekursorskog rastvora koloidnih nanočestica TiO_2 prethodno površinski modifikovanih. Set od više različitih prekursorskih rastvora moguće je pripremiti površinskom modifikacijom koloidnog sistema nanokristalita TiO_2 sintentisanih u okviru prvog dela ovih istraživanja, pri različitim koncentracijama liganda (dopamina) u odnosu na ukupnu koncentraciju aktivnih mesta za adsorpciju. U okviru ovog segmenta istraživanja, izvršiće se i strukturna, optička karakterizacija, kao i određivanje stehiometrijskog sastava kompleksa između dopamina i površinskih atoma titana. Sinteza prahova polazeći od prethodno modifikovanih prekursorskih rastvora TiO_2 , biće izvedena na već opisanom laboratorijskom postrojenju za sprej pirolizu. Očekuje se da izbor temperaturnog profila i vremena zadržavanja, odnosno, optimalni uslovi sinteze, budu ustanovljeni na osnovu prvog dela ovog istraživanja i u skladu sa temperaturom dekompozicije modifikatora. Uticaj različite koncentracije modifikatora na finalne strukturne, morfološke i funkcionalne karakteristike prahova biće ispitivan opisanim metodama strukturne, morfološke i optičke karakterizacije dobijenih prahova.

U trećoj fazi istraživanja planiranoj u okviru ovog rada, proučavaće se složeni mehanizam konverzije kapi u česticu u procesima nukleacije, rasta i kolizije primarnih nanočestica u sferični asembl - sekundarnu česticu. Kontrola nad strukturnim i morfološkim karakteristikama čestica i posebno definisanje egzaktna korelacije veličine kapi/čestice sa parametrima procesa, baziraće se na konceptima termičke i masene ravnoteže, odnosno, postavljanju seta diferencijalnih jednačina koje opisuju simultani prenos toplote i mase pri laminarnom režimu obstrujavanja sfere. Pri tome će se početi od pretpostavke da do formiranja čestica dolazi u procesu koji se odigrava u toku dve faze: prve faze, u kojoj dolazi do isparavanja sa površine kapi uz značajan pad vrednosti prečnika kapi, sa početne vrednosti poluprečnika r_0 do r_1 i druge faze, u kojoj posle isparavanja, dolazi do sušenja i formiranja čvrste čestice krajnjeg prečnika r_2 dispergovane u struji nosećeg gasa. Planirano je da dobijeni rezultati budu upoređeni sa modelima koji predskazuju veličinu čestice, brzinu isparavanja kontinualne tečne faze kapi kao i kriterijumima koji predskazuju finalnu morfologiju čestica, tj. predviđaju dobijanje punih ili šupljih čestica.

U skladu sa prethodno obrazloženim razmatranjima, predviđena doktorska disertacija će obuhvatati sledeća poglavlja: UVOD, TEORIJSKI DEO, EKSPERIMENTALNI DEO, REZULTATI, DISKUSIJA, ZAKLJUČCI, LITERATURA, i PRILOG.

U poglavlju **UVOD** biće istaknuta važnost izraživanja u oblasti nanotehnologija i nanostrukturnih materijala. U ovom poglavlju biće razmotrene postojeće metode sinteze nanostrukturnih materijala sa posebnim osvrtom na prednosti metoda sinteze u disperznom sistemu i u okviru toga, na metodu aerosol sinteze. Pored navedenog, biće opisan i značaj fotokatalitičkih procesa i uspostavljena korelacija sa strukturnim, morfološkim i funkcionalnim karakteristikama inovativnih fotokatalitičkih materijala. Posebno će biti akcentovan značaj titanijum(IV)-oksida sa stanovišta fotokatalitičkih procesa. Predviđeno je da u ovom delu budu sa više detalja opisan predmet istraživanja, naučni značaj problema koji se istražuje, koncepcija rada i polazne hipoteze. U poglavlju **TEORIJSKI DEO**, planirana je obrada sledećih celina: Metoda aerosol sinteze, Modelovanje procesa aerosol sinteze, Heterogena kataliza i Površinska modifikacija. U sklopu celine Metoda aerosol sinteze biće dat pregled razvoja metode, biće objašnjeni osnovni principi sinteze, sa posebnim osvrtom na uticajne parametre u procesu formiranja čestica željenih strukturnih i morfoloških karakteristika. U celini Modelovanje

procesa aerosol sinteze planirano je da budu teorijski opisani do sada razvijeni modeli kojima će se objasniti stadijumi tokom konverzije kapi u česticu, kao i uticajni parametri procesa na karakteristike dobijenih čestica. U celini Heterogena kataliza biće objašnjen osnovni mehanizam fotokatalitičkih reakcija i posebno će biti prikazani uloga i značaj titanijum dioksida u fotokatalitičkim procesima. U okviru ove celine biće razmotrene najvažnije strukturne karakteristike kompaktnog i nanometarskog titanijum(IV)-oksida, u sklopu kojih će biti posebno objašnjene karakteristike koje su od važnosti u fotokatalitičkim procesima. U poslednjoj celini ovog poglavlja biće dat prikaz problematike površinske modifikacije titanijum(IV)-oksida, u sklopu koje će biti razmotreni mogući pravci u oblasti istraživanja, kao i fenomeni koji rezultuju promenom optičkih i elektronskih karakteristika u odnosu na nemodifikovane čestice. Uz kontekstu obrade svake od predviđenih celina, planirana je detaljna analiza pregleda istraživanja u oblasti. U **EKSPERIMENTALNOM DELU** biće detaljno prikazana metodologija eksperimentalnog rada u okviru svih predviđenih faza sinteze i karakterizacije, sa detaljnim opisom materijala i metoda korišćenih tokom predloženih istraživanja. U kontekstu toga, sa više detalja će biti opisan postupak pripreme koloidnih prekursorskih rastvora, sinteza prahova dobijenih metodom aerosol sinteze, kao i metodologija površinske modifikacije prekursorskih rastvora, odnosno, rezultujućih prahova. Pored navedenog, biće opisani i svi uslovi prilikom karakterizacije, metode karakterizacije, kao i metode korišćene za obradu dobijenih eksperimentalnih rezultata i postavljanje matematičkog mehanizma za predviđanje veličine čestice. U poglavlju **REZULTATI** biće izloženi svi najvažniji rezultati dobijeni tokom predloženih istraživanja. Planirano je da u prvom potpoglavlju budu izloženi rezultati karakterizacije koloidnog rastvora nanočestica TiO_2 , kao i rezultati karakterizacije sintetizovanih prahova primenom metode aerosol sinteze polazeći od nemodifikovanog prekursora, odnosno, rezultati površinske modifikacije ovih prahova. U drugom delu ovog poglavlja planirano je da se prikažu rezultati karakterizacije površinski modifikovanog koloidnog rastvora nanočestica, kao i rezultati karakterizacije prahova dobijenih na bazi ovih prekursora metodom niskotemperaturne aerosol sinteze. Takođe, u ovom delu će biti prikazani rezultati analize kriterijalnih jednačina za prenos količine kretanja i prenos mase, tokom transporta aerosola u disperznom sistemu, kao i rešenja postavljenih diferencijalnih jednačina koje definišu simultani prenos toplote i mase pri laminarnom režimu opstrujavanja sfere. U poglavlju **DISKUSIJA** ove disertacije planirano je da svi eksperimentalni rezultati ostvareni tokom izrade doktorske teze budu diskutovani u kontekstu dosadašnjih naučnih saznanja u oblasti i upoređeni sa literaturnim podacima. U okviru toga, posebno će biti analizirane strukturne i morfološke karakteristike dobijenih prahova sa aspekta dobijanja kontrolisane hijerarhijske strukture Ti(IV) oksida, kao i definisanje egzaktna korelacije veličine kapi/čestice sa parametrima procesa. Posebna težina biće data rezultatima koji se odnose na funkcionalizaciju površine čestica Ti(IV) oksida i dirigovano dobijanje hibridnih struktura u sistemu oksid-ligand, kao i njihov uticaj na poluprovodne i optičke karakteristike rezultujućeg sistema. U **ZAKLJUČKU** je planirano sumiranje svih postignutih rezultata tokom izvršenih istraživanja, na osnovu kojih će biti izvedeni koncizni zaključci koji će odgovarati postavljenim ciljevima ove disertacije. Poglavlje **LITERATURA** će sadržati spisak korišćene literature citirane u ovoj disertaciji, kao i radove proistekle iz istraživanja u okviru ove doktorske disertacije. Na kraju rada, u poglavlju **PRILOG** biće data lista simbola, suplementnih rezultata, kao i biografija kandidata, bibliografija kandidata i štampane elektronske verzije publikovanih radova.

7. Zaključak i predlog

Na osnovu izložene analize, Komisija smatra da je predložena tema kandidata Ivana M. Dugandžića, dipl. inž. tehnologije „STRUKTURNE, MORFOLOŠKE I FUNKCIONALNE KARAKTERISTIKE HIBRIDNIH NANOČESTICA TITAN(IV)-OKSIDA DOBIJENIH METODOM NISKOTEMPERATURNE AEROSOL SINTEZE” naučno zasnovana i predlaže Nastavno-naučnom veću da je prihvati. Komisija ocenjuje na osnovu dosadašnjeg rada da je kandidat izrazito podoban za realizaciju pomenutih istraživanja. Za mentora se predlaže dr Željko Grbavčić, redovni profesor Tehnološko-metalurškog fakulteta Univerziteta u Beogradu. Istraživanja u okviru ove doktorske disertacije pripadaju naučnoj oblasti Tehnološko inženjerstvo za koju je Tehnološko-metalurški fakultet, matična ustanova.

Beograd, 18. februar 2013.

ČLANOVI KOMISIJE:

dr Željko Grbavčić, redovni profesor
Tehnološko-metalurški fakultet, Univerzitet u Beogradu

dr. Olivera Milošević, naučni savetnik
Institut tehničkih nauka SANU

dr. Karlo Raić, redovni profesor
Tehnološko-metalurški fakultet, Univerzitet u Beogradu

dr. Jovan Nedeljković, naučni savetnik
Institut za nuklearne nauke Vinča, Univerzitet u Beogradu

dr. Dragana Jovanović, naučni saradnik
Institut za nuklearne nauke Vinča, Univerzitet u Beogradu