

TEHNOLOŠKO-METALURŠKI
FAKULTET

35/78
(Broj zahteva)

29.03.2013.
(Datum)

UNIVERZITET U BEOGRADU

Veće naučnih oblasti tehničkih nauka
(Naziv veća naučne oblasti i kome se
zahtev upućuje)

Z A H T E V
za davanje saglasnosti na predlog teme doktorske disertacije

Molimo da, shodno članu 46. st. 5. tačl. 3 Statuta Univerziteta u Beogradu („Glasnik Univerziteta“, broj 131/06),
date saglasnost na predlog teme doktorske disertacije:

**„KOEFIČIJENTI AKTIVNOSTI U TROKOMPONENTNIM VODENIM RASTVORIMA
ELEKTROLITA SA ZAJEDNIČKIM KALIJUM JONOM NA $T=298,15K$ “**

(pun naziv predložene teme doktorske disertacije)

NAUČNA OBLAST: TEHNOLOŠKO INŽENJERSTVO

PODACI O KANDIDATU:

1. Ime, ime jednog od roditelja i prezime kandidata:

DANIELA (Živadin) POPOVIĆ

2. Naziv i sedište fakulteta na kome je stekao visoko obrazovanje: Univerzitet u Beogradu-Tehnološko-metalurški
fakultet

3. Godina diplomiranja: 2009.

4. Naziv magistarske teze kandidata: /

Upisana na doktorske studije šk. 2010/2011. godine.

5. Naziv fakulteta na kome je magistarska teza odbranjena: /

6. Godina odbrane magistarske teze: /

Obaveštavam Vas da je Nastavno-naučno veće,

(naziv nadležnog tela Fakulteta)

na sednici održanoj **28.03.2013. godine** razmotrilo predloženu temu i zaključilo da je tema podobna za izradu
doktorske disertacije.

DEKAN FAKULTETA

Prof. dr Đorđe Janačković

Prilog: 1. Predlog teme doktorske disertacije sa obrazloženjem.

2. Akt nadležnog tela fakulteta o podobnosti teme za izradu doktorske disertacije.

3. Podaci o mentoru

Na osnovu čl. 30. stav 3. Zakona o visokom obrazovanju, čl. 38. Statuta TMF-a i čl. 32. Pravilnika o doktorskim studijama TMF, na sednici Nastavno-naučnog veća Tehnološko-metalurškog fakulteta od 28.03.2013. godine, doneta je

O D L U K A

*o prihvatanju Izveštaja Komisije za ocenu naučne zasnovanosti
teme i odobrenju izrade doktorske disertacije*

Prihvata se Izveštaj Komisije za ocenu naučne zasnovanosti predložene teme i odobrava izrada *doktorske disertacije* doktorantu **DANIELI POPOVIĆ**, dipl. inž., pod nazivom: **„KOEFIČIJENTI AKTIVNOSTI U TROKOMPONENTNIM VODENIM RASTVORIMA ELEKTROLITA SA ZAJEDNIČKIM KALIJUM JONOM NA $T = 298,15$ K“**, uz uslov da Veće naučnih oblasti Univerziteta u Beogradu da saglasnost na predlog teme.

Za mentora se određuje: dr Jelena Miladinović, vanredni profesor TMF.

Odluku dostaviti: Veću naučnih oblasti na saglasnost, kandidatu, mentoru, Službi za nastavno studentske poslove i arhivi Fakulteta.

D E K A N

Prof. dr Đorđe Janačković

ПОДАЦИ О МЕНТОРУ

за кандидата Даниелу Ж. Поповић

Име и презиме ментора: Јелена Миладиновић

Звање: ванредни професор Технолошко–металуршког факултета, Универзитета у Београду

Списак радова који квалификују ментора за вођење докторске дисертације:

1. Jelena Miladinović, Rozalija Ninković, Milica Todorović, Joseph A. Rard, »Isopiestic Investigation of the Osmotic and Activity Coefficients of $\{y\text{MgCl}_2 + (1-y)\text{MgSO}_4\}(\text{aq})$ and the Osmotic Coefficients of $\text{Na}_2\text{SO}_4\cdot\text{MgSO}_4(\text{aq})$ at 298.15 K«, *J. Solution Chem.*, **37** (3) (2008) 307-329. ISSN 0095-9782 IF 2008: 1.241
2. Jelena M. Miladinović, Milica D. Todorović and Rozalija R. Ninković, »Influence of Hydrolysis on the Osmotic Coefficients of the System $\{y\text{ZnCl}_2 + (1-y)\text{ZnSO}_4\}(\text{aq})$ at Temperature 298.15 K«, *J. Chem. Eng. Data*, **54** (2) (2009) 526-530. (Part of the special issue “Robin H. Stokes Festschrift”) ISSN 0021-9568 IF 2009:1.695.
3. Daniela Z. Popović, Jelena Miladinović, Milica D. Todorović, Milorad M. Zrilić, Joseph A. Rard » Isopiestic determination of the osmotic and activity coefficients of the $\{y\text{KCl} + (1 - y)\text{K}_2\text{HPO}_4\}(\text{aq})$ system at $T = 298.15\text{ K}$ «, *J. Chem. Thermodyn.*, **43** (12) (2011) 1877-1885. ISSN 0021-9614 IF 2011: 2.422.
4. Daniela Z. Popović, Jelena Miladinović, Milica D. Todorović, Milorad M. Zrilić, Joseph A. Rard »Isopiestic Determination of the Osmotic and Activity Coefficients of $\text{K}_2\text{HPO}_4(\text{aq})$, Including Saturated and Supersaturated Solutions, at $T = 298.15\text{ K}$ «, *J. Solution Chem.*, **40** (5) (2011) 907-920. ISSN 0095-9782 IF 2011: 1.415.
5. Daniela Z. Popović, Jelena Miladinović, Zoran P. Miladinović, Branislav B. Ivošević, Milica D. Todorović, Joseph A. Rard » Isopiestic determination of the osmotic and activity coefficients of the $\{y\text{KNO}_3 + (1 - y)\text{K}_2\text{HPO}_4\}(\text{aq})$ system at $T = 298.15\text{ K}$ «, *J. Chem. Thermodyn.*, **55** (2012) 172-183. ISSN 0021-9614 IF 2011: 2.422.

Заокружити одговарајућу опцију (А, Б, В или Г):

А) У случају менторства дисертације на докторским студијама у групацији техникотехнолошких, природно-математичких и медицинских наука ментор треба да има најмање три рада са SCI, SSCI, AHCI или SCIE листе, као и Math-Net.Ru листе.

Б) У случају менторства дисертације на докторским студијама у групацији друштвено-хуманистичких наука ментор треба да има најмање три рада са релевантне листе научних часописа (Релевантна листа научних часописа обухвата SCI, SSCI, AHCI и SCIE листе, као и ERIH листу, листу часописа које је Министарство за науку класификовало као M24 и додатну листу часописа коју ће, на предлог универзитета, донети Национални савет за високо образовање. Посебно се вреднују и монографије које Министарство науке класификује као M11, M12, M13, M14, M41 и M51.)

В) У случају израде докторске дисертације према ранијим прописима за кандидате који су стекли академски назив магистра наука ментор треба да има пет радова (референци) које га, по оцени Већа научних области, квалификују за ментора односне дисертације.

Г) У случају да у ужој научној области нема квалификованих наставника, приложити одлуку Већа докторских студија о именовању редовног професора за ментора.

ДЕКАН ФАКУЛТЕТА

Датум: 26.03.2013.

М.П.

Проф. др Ђорђе Јанаћковић

Наставно-научном већу
Технолошко-металуршког факултета
Универзитета у Београду

На седници Наставно-научног већа Технолошко-металуршког факултета Универзитета у Београду одржаној 27. 12. 2012. године, именовани смо за чланове Комисије за оцену научне заснованости теме докторске дисертације кандидата дипл. инг. Даниеле Поповић, студента докторских студија, под називом: **„Коефицијенти активности у трокомпонентним воденим растворима електролита са заједничким калијум јоном на $T = 298,15\text{ K}$ “**. Након прегледа и анализе достављеног материјала, Комисија подноси следећи

ИЗВЕШТАЈ

1. Подаци о кандидату

Кандидат Даниела Поповић је рођена 23. 08. 1975. године у Тузли, Босна и Херцеговина. Основну школу и прву годину гимназије „Меша Селимовић“ завршава 1991. године у Тузли, а након преласка у Београд и „Прву београдску гимназију“ са одличним успехом. Дипломирала је 2009. године на Катедри за Неорганску хемијску технологију Технолошко-металуршког факултета, Универзитета у Београду са просечном оценом 7,17 и оценом дипломског рада 10 на тему: „Термодинамичке особине система калијум–хлорид+натријум–хлорид+вода у интервалу температуре од 298,15 K до 474,15 K“. Исте године укључује се волонтерски, у истраживачки рад на Катедри за Неорганску хемијску технологију из области термодинамике раствора електролита. Школске 2010/2011. године уписује докторске студије на Технолошко–металуршком факултету, студијски програм Хемијско инжењерство. Полаже све испите предвиђене планом и програмом докторских студија са просечном оценом 9,58 и оценом 10 на завршном испиту.

Назив предмета	Оцена	ESPB
Термодинамика раствора електролита	10	4
Хемијска термодинамика	10	5
Феномени преноса у инжењерству материјала	10	5
Фазна равнотежа у вишекомпонентним системима	10	4
Теоријски основи керамике и стакла	10	5
Виши курс аналитичке хемије	9	5
Управљање квалитетом и оптимизација процеса у графичкој индустрији	10	4
Синтеза својства и примена биокерамичких материјала	10	4
Структура стакла и стакластих материјала	10	4

Теорија процеса сагоревања	10	5
Математичка обрада експерименталних података	6	5
Завршни испит	10	
	9,58	30

Од 2010. године ангажована је на пројекту Министарства просвете, науке и технолошког развоја ОИ172063 и запослена у Иновационом центру Технолошко–металуршког факултета као истраживач–приправник.

У току досадашњег рада кандидат Даниела Поповић је објавила три рада у врхунским међународним часописима категорије M21 и два рада у међународним часописима категорије M23 као и четири саопштења са међународних скупова штампана у целини. Служи се енглеским и руским језиком.

1.1. Списак објављених радова који опредељују афинитет кандидата на предложеној теми

Научни радови објављени у врхунском часопису међународног значаја (M21)

1. **Daniela Z. Popović**, Jelena Miladinović, Milica D. Todorović, Milorad M. Zrilić, Joseph A. Rard » Isopiestic determination of the osmotic and activity coefficients of the $\{y \text{ KCl} + (1 - y) \text{ K}_2\text{HPO}_4\}(\text{aq})$ system at $T = 298.15 \text{ K}$ «, *Journal of Chemical Thermodynamics*, 43 (12) (2011) 1877-1885. ISSN 0021-9614 IF 2011: 2.422.

2. **Daniela Z. Popović**, Jelena Miladinović, Zoran P. Miladinović, Branislav B. Ivošević, Milica D. Todorović, Joseph A. Rard » Isopiestic determination of the osmotic and activity coefficients of the $\{y \text{ KNO}_3 + (1 - y) \text{ K}_2\text{HPO}_4\}(\text{aq})$ system at $T = 298.15 \text{ K}$ «, *Journal of Chemical Thermodynamics*, 55 (2012) 172-183.
ISSN 0021-9614 IF 2011: 2.422.

3. **Daniela Z. Popović**, Jelena Miladinović, Zoran P. Miladinović, Snežana R. Grujić, Milica D. Todorović, Joseph A. Rard » Isopiestic determination of the osmotic and activity coefficients of the $\{y \text{ KBr} + (1 - y) \text{ K}_2\text{HPO}_4\}(\text{aq})$ system at $T = 298.15 \text{ K}$ «, *Journal of Chemical Thermodynamics*, <http://dx.doi.org/10.1016/j.jct.2013.03.003>

Научни радови објављени у часопису међународног значаја (M23)

1. **Daniela Z. Popović**, Jelena Miladinović, Milica D. Todorović, Milorad M. Zrilić, Joseph A. Rard » Isopiestic Determination of the Osmotic and Activity Coefficients of $\text{K}_2\text{HPO}_4(\text{aq})$, Including Saturated and Supersaturated Solutions, at $T = 298.15 \text{ K}$ «, *Journal of Solution Chemistry*, 40 (5) (2011) 907-920. ISSN 0095-9782 IF 2011: 1.415.

2. Daniela Popović, Goran Stupar, Jelena Miladinović, Milica Todorović and Milorad Zrilić »Solubility in the Ternary System $\text{CaSO}_4+\text{Na}_2\text{SO}_4+\text{H}_2\text{O}$ at $T = 298.15 \text{ K}$ «, *Russian Journal of Physical Chemistry A*, 85 (13) (2011) 2349-2353. ISSN 0036-0244 IF 2011: 0.443.

Саопштење са међународног скупа штампано у целини (M33)

1. **D. Popović**, J. Miladinović and M. Todorović »Temperature Dependence of the Pitzer's Ion–Interaction Model Parameters of NaCl(aq) and KCl(aq) «, 10th International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry, Belgrade, Serbia, 2010, Proceedings vol. I p. 46-48.
2. G. Stupar, **D. Popović**, J. Miladinović and M. Todorović » Prediction of Calcium Sulfate Dihydrate Solubility in the System $\text{CaSO}_4+\text{Na}_2\text{SO}_4+\text{H}_2\text{O}$ at $T = 298,15 \text{ K}$ «, 10th International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry, Belgrade, Serbia, 2010, Proceedings vol. I p. 37-39.
3. M. Zrilić, K. Obradović- Đurišić, D. Gavrilov, I. Balać, B. Jokić, **D. Popović**, P. Uskoković: “Shear bond strength of dental self-adhesive resin cements“, 14-th international research/expert conference, TMT 2010, 2010, Mediterranean Cruise, Proceedings, 77-80.
4. B. V. Djulinčević, **D. Ž. Popović**, J. M. Miladinović and M. D. Todorović »Solubility of the Quaternary System $\text{K}_2\text{SO}_4+\text{Na}_2\text{SO}_4+\text{MgSO}_4+\text{H}_2\text{O}$ at $T = 298.15 \text{ K}$ «, 11th International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry, Belgrade, Serbia, 2012, Proceedings vol. I p. 43-45.

1.2. Оцена подобности кандидата за рад на предложеној теми

На основу биографских података, списка објављених радова и досадашњег рада са кандидатом, Комисија оцењује да је кандидат подобан за рад на предложеној теми.

2. Предмет и циљ истраживања

Вишекомпонентни раствори електролита имају значајну улогу у хемијској индустрији, у хидрометалургији и геохемији. Познавање термодинамичких особина електролитних система је важно за проучавање и разумевање теорије раствора електролита као и за управљање, пројектовање, симулацију и моделовање технолошких поступака производње и уређаја у хемијској индустрији а нарочито у технологији неорганских соли.

Проучавање термодинамичких особина вишекомпонентних раствора електролита је од великог значаја за описивање понашања ових система у широком опсегу концентрација које је последица сложених интеракција типа јон–јон и јон–растварач. Одступања од идеалности реалних система се могу квантитативно окарактерисати коефицијентима активности електролита у раствору и осмотским коефицијентима растварача. Познавање ових особина је корисно са једне стране због теоријског значаја и могућности одређивања величина као што су Gibbs–ова енергија раствора, напон паре растварача, електромоторна сила реверзибилних ћелија итд. а са друге стране за предвиђање тока одвијања производних процеса у технологији неорганских соли.

Натријум и калијум соли фосфорне киселине имају комерцијалан значај јер се јављају као компоненте стандардних пуферских система који се користе за калибрацију рН–метара. Соли попут калијум–хидрогенфосфата и амонијум–хидрогенфосфата се широко користе као ђубрива а калијум–хидрогенфосфат врло често као адитив храни посебно за спречавање коагулације протеина. Фосфати се у ниским концентрацијама могу наћи и у природним водама.

У теорији раствора електролита постоје извесна неслагања у стандардним термодинамичким особинама фосфора и његових једињења нарочито када је у питању стандардна ентропија $\text{H}_2\text{PO}_4^{2-}(\text{aq})$ и $\text{HPO}_4^{2-}(\text{aq})$ јона на $T = 298,15 \text{ K}$ и стандардном притиску^{1,2}. Наглашена је потреба за прецизним подацима особина водених раствора $\text{K}_2\text{HPO}_4(\text{cr})$ и $(\text{NH}_4)_2\text{HPO}_4(\text{cr})$ као што су растворљивост и коефицијенти активности за област високих концентрација, све до границе засићења³.

Досадашња истраживања термодинамичких особина водених раствора калијум–хидрогенфосфата се односе на изопиестичка мерења осмотских коефицијената на $T = 298,15 \text{ K}$ у области разблажених раствора⁴, као и на мерења напона паре растварача на $T = 310 \text{ K}$ ⁵. За интервал температура од $383,15 \text{ K}$ до $523,15 \text{ K}$ могу се наћи вредности осмотских коефицијената раствора $\text{K}_2\text{HPO}_4(\text{aq})$ одређене изопиестичком методом у области умерених концентрација⁶. Једини систем са $\text{K}_2\text{HPO}_4(\text{cr})$ који је до сада испитан је $\text{K}_2\text{HPO}_4 + \text{KH}_2\text{PO}_4 + \text{H}_2\text{O}$ волуметријском и изопиестичком методом на $T = 298,15$.

Због очигледног недостатка термодинамичких података за електролитне системе са калијум–хидрогенфосфатом, предмет истраживања ове докторске дисертације је одређивање и проучавање својстава система $\text{K}_2\text{HPO}_4(\text{aq})$ и система у којима се $\text{K}_2\text{HPO}_4(\text{cr})$ налази као конституент раствора. За разматрање су одабрана три раствора са заједничким калијум јоном, и то: $\text{K}_2\text{HPO}_4 + \text{KCl} + \text{H}_2\text{O}$, $\text{K}_2\text{HPO}_4 + \text{KBr} + \text{H}_2\text{O}$ и $\text{K}_2\text{HPO}_4 + \text{KNO}_3 + \text{H}_2\text{O}$. Експериментална мерења обухватиће примену изопиестичке

методе за одређивање осмотских коефицијената раствора $K_2HPO_4(aq)$ као и за одређивање растворљивости соли у овом раствору на $T = 298,15$. Осмотски коефицијенти трокомпонентних система $K_2HPO_4+KCl+H_2O$, $K_2HPO_4+KBr+H_2O$ и $K_2HPO_4+KNO_3+H_2O$ биће одређени у широком опсегу јонске јачине раствора и удела јонске јачине електролита.

На основу обраде експерименталних резултата применом термодинамичких модела како за двокомпонентне системе $K_2HPO_4(aq)$, $KBr(aq)$ и $KNO_3(aq)$ тако и за испитиване трокомпонентне системе биће одређени параметри модела и прорачунате вредности коефицијената активности електролита у функцији јонске јачине раствора. За моделовање двокомпонентних система користиће се Јон–интеракциони модел⁷ и модел на бази молских удела (Clegg–ов модел)⁸ а за трокомпонентне, модели који су у теорији раствора показали најбоље резултате⁷⁻⁹. Разматрањем понашања коефицијената активности електролита, у системима са заједничким калијум јоном, у функцији јонске јачине раствора и удела јонске јачине електролита биће омогућен увид у сложене интеракције јона као последице мешања електролита. Наведене активности довешће до бољег фундаменталног познавања својстава испитиваних раствора и до неопходних информација за унапређење постојећих процеса везаних за технологију неорганских соли.

Литература:

1. Cox, J. D., Wagman, D. D., Medvedev, V. A.: CODATA Key Values for Thermodynamics. Hemisphere, New York (1989)
2. Waterfield, C. G., Staveland, L. A. K.: Thermodynamic investigation of disorder in the hydrates of disodium hydrogen phosphate. *Trans. Faraday Soc.* **63**, 2349–2356 (1967)
3. Rard, J. A., Wolery, T. J.: The standard chemical-thermodynamic properties of phosphorus and some of its key compounds and aqueous species: An evaluation of differences between the previous recommendations of NBS/NIST and CODATA. *J. Solution Chem.* **36**, 1585–1599 (2007)
4. Scatchard, G., Breckenridge, R. C.: Isotonic solutions. II. The chemical potential of water in aqueous solutions of potassium and sodium phosphates and arsenates at 25°. *J. Phys. Chem.* **58**, 596–602 (1954)
5. Burge, D. E.: Osmotic coefficients in aqueous solutions. Studies with the vapor pressure osmometer. *J. Phys. Chem.* **67**, 2590–2593 (1963)

6. Holmes, H. F., Simonson, J. M., Mesmer, R. E.: Aqueous solutions of the mono- and di-hydrogenphosphate salts of sodium and potassium at elevated temperatures. Isopiestic results. *J. Chem. Thermodyn.* **32**, 77–96 (2000)
7. K. S. Pitzer, in: K. S. Pitzer (Ed.), Activity Coefficients in Electrolyte Solutions, second ed., CRC Press, Boca Raton, 1991 (Chapter 3).
8. Clegg, S. L., Pitzer, K. S., Brimblecombe, P.: Thermodynamics of multicomponent, miscible, ionic solutions. 2. Mixtures including unsymmetrical electrolytes. *J. Phys. Chem.* **96**, 9470–9479 (1992); Corrections. **98**, 1368 (1994)
9. Rard, J. A., Wijesinghe, A. M., Conversion of parameters among variants of Scatchard's neutral-electrolyte model for electrolyte mixtures that have different number of mixing terms. *J. Solution Chem.* **37** (8) 1149–1185 (2008)

3. Полазне хипотезе

На основу увида у досадашња истраживања из области термодинамике раствора са калијум–хидрогенфосфатом утврђено је да постоји потреба за одређивањем и дефинисањем термодинамичких особина ових раствора са циљем проширења фонда података о осмотским коефицијентима, средњим јонским коефицијентима активности и допунској Gibbs–овој енергији раствора. С тим у вези, биће изведена серија експеримената ради одређивања осмотских коефицијената двокомпонентних система: $\text{K}_2\text{HPO}_4(\text{aq})$, $\text{KBr}(\text{aq})$, $\text{KNO}_3(\text{aq})$ и $\text{KCl}(\text{aq})$ као конституената трокомпонентних система: $\text{K}_2\text{HPO}_4 + \text{KCl} + \text{H}_2\text{O}$, $\text{K}_2\text{HPO}_4 + \text{KBr} + \text{H}_2\text{O}$ и $\text{K}_2\text{HPO}_4 + \text{KNO}_3 + \text{H}_2\text{O}$, на $T = 298,15$ К. Поред тога услед потребе за прецизним подацима за растворљивост K_2HPO_4 у води на $T = 298,15$ К и могућим облицима чврсте фазе у метастабилној и стабилној равнотежи са засићеним раствором биће изведена додатна мерења применом изопиестичке методе.

Експериментални подаци ће бити обрађени применом термодинамичких модела као што су: Јон–интеракциони модел, модел на бази молских удела (Clegg-ов модел) и модел Scatchard–а. На тај начин одређеним параметрима модела, биће могуће извести прорачун средњих јонских коефицијената активности електролита у испитиваним системима у широком опсегу јонске јачине раствора и удела јонске јачине електролита као и допунске Gibbs–ове енергије раствора.

Разматрањем понашања коефицијената активности у разматраним системима у зависности од концентрације раствора биће проучаване интеракције типа: $\text{Cl}^- - \text{HPO}_4^{2-}$, $\text{Br}^- - \text{HPO}_4^{2-}$, $\text{NO}_3^- - \text{HPO}_4^{2-}$ и $\text{K}^+ - \text{Cl}^- - \text{HPO}_4^{2-}$, $\text{K}^+ - \text{Br}^- - \text{HPO}_4^{2-}$, $\text{K}^+ - \text{NO}_3^- - \text{HPO}_4^{2-}$.

Може се претпоставити да ће се на основу добијених резултата стећи бољи увид у теорију раствора ових система, за које нема података у литератури, и да ће моћи да се објасне појаве које се у њима јављају као последица интеракција и сложене структуре.

4. Научне методе истраживања

За реализацију предложених истраживања биће изведена серија мерења на изопиестичкој апаратури која је посебно конструисана и унапређена у ту сврху. Заснива се на изједначавању активности растварача у референтном и испитиваним растворима, када је систем у равнотежи на одређеној температури и притиску. Ова апаратура ће бити коришћена за одређивање осмотских коефицијената у испитиваним системима као и за утврђивање границе растворљивости у систему $K_2HPO_4(aq)$ на $T = 298,15$ К. За одређивање молалности основних раствора, који су конституенти мешаних, биће коришћене класичне аналитичке методе. За потребе обраде експерименталних података, предвиђање и прорачун коефицијената активности и допунске Gibbs–ове енергије раствора користиће се термодинамички модели развијени у програмском пакету Matlab.

5. Очекивани научни допринос

Очекује се да ће истраживања планирана у оквиру ове докторске дисертације дати вишеструко значајан научни допринос, при чему се може издвојити следеће:

- Поуздано одређивање термодинамичких својстава изабраних система;
- Проширење термодинамичке базе података новим, поузданим експерименталним подацима како за растворљивост калијум–хидрогенфосфата тако и за осмотске коефицијенте трокомпонентних система који садрже калијум–хидрогенфосфат;
- Одређивање термодинамичких особина као што су допунска Gibbs–ова енергије раствора и средњи јонски коефицијенти активности електролита у системима: $K_2HPO_4 + KCl + H_2O$, $K_2HPO_4 + KBr + H_2O$ и $K_2HPO_4 + KNO_3 + H_2O$, на $T = 298,15$ К;
- Анализа сложених интеракција типа јон–јон и јон–растварач која ће допринети бољем разумевању и објашњењу појава у испитиваним системима;

- Испитивање и анализа применљивости различитих термодинамичких модела за предвиђање, корелисање и прорачун термодинамичких особина испитиваних система.

6. План истраживања и структура рада

План истраживања обухвата следеће активности: литературни преглед претходних истраживања из области термодинамике раствора са калијум–хидрогенфосфатом; избор вишекомпонентних система који садрже калијум–хидрогенфосфат за испитивање; експериментално одређивање осмотског коефицијента растварача и растворљивости K_2HPO_4 у систему $K_2HPO_4(aq)$ на $T = 298,15\text{ K}$; експериментално одређивање осмотских коефицијената у одабраним системима $K_2HPO_4 + KCl + H_2O$, $K_2HPO_4 + KBr + H_2O$ и $K_2HPO_4 + KNO_3 + H_2O$; обрада експерименталних резултата применом одабраних термодинамичких модела; прорачун коефицијената активности електролита и допунске Gibbs–ове енергије испитиваних раствора; анализа примене различитих термодинамичких модела; анализа понашања термодинамичких особина испитиваних раствора у светлу могућих интеракција. Имајући у виду наведени план истраживања, очекује се да ће докторска дисертација имати следећу структуру:

1. Теоријска разматрања и модели

2. Експериментални део

– опис експерименталне технике рада за одређивање осмотских коефицијената и растворљивости

– приказ резултата експерименталних мерења

3. Обрада резултата

– примена одабраних термодинамичких модела и одређивање параметара двокомпонентних система и параметара мешања за трокомпонентне системе

– прорачун средњих јонских коефицијената активности електролита и допунске Gibbs–ове енергије раствора

4. Дискусија добијених резултата

5. Закључак

7. Закључак и предлог

На основу изложеног, Комисија сматра да је тема докторске дисертације „Коефицијенти активности у трокомпонентним воденим растворима електролита са заједничким калијум јоном на $T = 298,15\text{ K}$ “, предложена од стране дипл. инг. Даниеле Поповић, студента докторских студија, научно заснована, па предлаже Наставно-

научном већу Технолошко-металуршког факултета Универзитета у Београду да је прихвати и да именује др Јелену Миладиновић, ванр. проф. Технолошко-металуршког факултета Универзитета у Београду за ментора. Предложена тема припада научној области Хемија и Хемијска технологија за коју је Технолошко–металуршки факултет Универзитета у Београду, матична установа.

У Београду, 18. 03. 2013.

ЧЛАНОВИ КОМИСИЈЕ

1. Др Јелена Миладиновић, ванр. проф.

Технолошко-металуршки факултет, Универзитет у Београду

2. Др Милица Тодоровић, ред. проф. у пензији

Технолошко–металуршки факултет, Универзитет у Београду

3. Др Снежана Грујић, ванр. проф.

Технолошко–металуршки факултет, Универзитет у Београду

4. Др Зоран Миладиновић, научни сарадник

Институт за општу и физичку хемију, Београд