

Obrazac 2

TEHNOLOŠKO-METALURŠKI FAKULTET

UNIVERZITET U BEOGRADU

35/98
(Broj zahteva)
29.04.2013.
(datum)

VEĆE NAUČNIH OBLASTI TEHNIČKIH
NAUKA

(naziv veća naučne oblasti kome se zahtev upućuje)

Beograd, Studentski trg br. 1

ZAHTEV
za davanje saglasnosti na referat o urađenoj doktorskoj disertaciji

Molimo da, shodno članu 46. st.5 Statuta Univerziteta u Beogradu ("Glasnik Univerziteta" broj 131/06), date saglasnost na referat o urađenoj doktorskoj disertaciji kandidata

Mr ANDELE (Branko) KNEŽEVIĆ-STEVANović
(ime, ime jednog od roditelja i prezime)

KANDIDAT **Mr ANDELA (Branko) KNEŽEVIĆ-STEVANović**, prijavila je doktorsku disertaciju pod nazivom:

„EKSPERIMENTALNO ODREĐIVANJE I MODELOVANJE VOLUMETRIJSKIH SVOJSTAVA, INDEKSA REFRAKCIJE I VISKOZNOSTI VIŠEKOMPONENTNIH SISTEMA ORGANSKIH RASTVARAČA”

Iz naučne oblasti: **HEMIJA I HEMIJSKA TEHNOLOGIJA**

Univerzitet je dana 04.04.2011. godine, svojim aktom 02 broj 06-5161/20-11, dao saglasnost na predlog teme doktorske disertacije koja je glasila:

„EKSPERIMENTALNO ODREĐIVANJE I MODELOVANJE VOLUMETRIJSKIH SVOJSTAVA, INDEKSA REFRAKCIJE I VISKOZNOSTI VIŠEKOMPONENTNIH SISTEMA ORGANSKIH RASTVARAČA”

Komisija za ocenu i odbranu doktorske disertacije kandidata:

Mr ANDELE (Branko) KNEŽEVIĆ-STEVANović
obrazovana je na sednici održanoj 31.01.2013. odlukom fakulteta pod br. 35/26, u sastavu:

Ime i prezime člana komisije	Zvanje	Naučna oblast
1. Dr Mirjana Kijevčanin	Redovni profesor	Hemijsko inženjerstvo
2. Dr Slobodan Šerbanović	Redovni profesor	Hemijsko inženjerstvo
3. Dr Dušan Grozdanić	Redovni profesor	Hemijsko inženjerstvo

Nastavno-naučno veće fakulteta prihvatilo je izveštaj Komisije za ocenu i odbranu doktorske disertacije na sednici održanoj dana 28.03.2013. godine.

DEKAN FAKULTETA

Prilog:

1. Doktorska disertacija
2. Izveštaj Komisije sa predlogom
3. Akt Nastavno-naučnog veća Fakulteta o usvajanju izveštaj

Prof. dr Đorđe Janačković

Na osnovu čl. 128. Zakona o visokom obrazovanju i čl. 129. Statuta 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 o oceni doktorske disertacije

Prihvata se Izveštaj Komisije u sastavu: dr Mirjana Kijevčanin, redovni profesor Tehnološko-metalurškog fakulteta, dr Slobodan Šerbanović, redovni profesor Tehnološko-metalurškog fakulteta, dr Dušan Grozdanić, redovni profesor Tehnološko-metalurškog fakulteta u penziji, o pregledu i oceni urađene doktorske disertacije pod nazivom: „**EKSPERIMENTALNO ODREĐIVANJE I MODELOVANJE VOLUMETRIJSKIH SVOJSTAVA, INDEKSA REFRAKCIJE I VISKOZNOSTI VIŠEKOMPONENTNIH SISTEMA ORGANSKIH RASTVARAČA**“ koju je podnela **mr ANDELA KNEŽEVIĆ-STEVANović** i upućuje se na saglasnost Veću naučnih oblasti tehničkih nauka Univerziteta u Beogradu.

Veće naučnih oblasti tehničkih nauka Univerziteta u Beogradu dalo je saglasnost na predlog teme doktorske disertacije **mr ANDELE KNEŽEVIĆ-STEVANović** pod nazivom „**EKSPERIMENTALNO ODREĐIVANJE I MODELOVANJE VOLUMETRIJSKIH SVOJSTAVA, INDEKSA REFRAKCIJE I VISKOZNOSTI VIŠEKOMPONENTNIH SISTEMA ORGANSKIH RASTVARAČA**“ Odlukom 02 broj: 06-5161/20-11 od 04.04.2011. godine.

Rad u istaknutom međunarodnom časopisu (M22)

1. **A.B. Knežević-Stevanović**, S.P. Šerbanović, B.D. Djordjević, D.K. Grozdanić, J.D. Smiljanić, M.Lj. Kijevčanin, Experimental determination and modeling of densities and refractive indices of the binary mixtures of dimethylphthalate (or dimethyladipate) + 1-butanol, or +2-butanol, or +2-butanone at T = (288.15-323.15) K, Thermochimica Acta 533 (2012) 28-38 (IF (2011) = 1.805; ISSN: 0040-6031).

Radovi štampani u međunarodnom časopisu (M23):

1. **A.B. Knežević Stevanović**, G.M.Babić, M.Lj. Kijevčanin, S.P. Šerbanović, D.K. Grozdanić, Correlation of the liquid mixture viscosities, J. Serb. Chem. Soc. 77 (2012) 1083–1089 (IF (2011) = 0.879; ISSN: 0352-5139).
2. **A.B. Knežević-Stevanović**, J.D. Smiljanić, S.P. Šerbanović, I.R. Radović, M.Lj. Kijevčanin, Densities, Refractive Indices and Viscosities of the Binary Mixtures of Dimethyl phthalate or Dimethyl adipate with Tetrahydrofuran, J. Serb. Chem. Soc. (2013) – na recenziji, (IF (2011) = 0.879; ISSN: 0352-5139).

Odluku dostaviti: Veću naučnih oblasti tehničkih nauka Univerziteta, mentoru, Službi za nastavno-studentske poslove, Biblioteci i Arhivi fakulteta.

D E K A N

Prof. dr Đorđe Janačković

NASTAVNO-NAUČNOM VEĆU
TEHNOLOŠKO-METALURŠKOG FAKULTETA
UNIVERZITETA U BEOGRADU

Predmet: Referat o urađenoj doktorskoj disertaciji kandidatkinje mr Anđele Knežević Stevanović, dipl.inž.

Odlukom br. 35/36 od 31.01.2013. godine, imenovani smo za članove Komisije za pregled, ocenu i odbranu doktorske disertacije kandidatkinje mr Anđele Knežević Stevanović, dipl.inž. pod naslovom

Eksperimentalno određivanje i modelovanje volumetrijskih svojstava, indeksa refrakcije i viskoznosti višekomponentnih sistema organskih rastvarača

Posle pregleda dostavljene Disertacije i drugih pratećih materijala i razgovora sa Kandidatkinjom, Komisija je sačinila sledeći

R E F E R A T

1. UVOD

1.1. Hronologija odobravanja i izrade disertacije

24.02.2011. – Kandidatkinja mr Anđela Knežević Stevanović, dipl.inž. prijavila je temu doktorske disertacije pod nazivom: "Eksperimentalno određivanje i modelovanje volumetrijskih svojstava, indeksa refrakcije i viskoznosti višekomponentnih sistema organskih rastvarača", a Nastavno naučno veće Tehnološko metalurškog fakulteta u Beogradu usvojilo sastav Komisije za ocenu naučne zasnovanosti predložene teme.

Napomena: Kandidatkinja je uslov za prijavu teme ispunila jer je 1995. godine odbranila magistarski rad:

A.B. Knežević-Stevanović, Dopunske entalpije binarnih i ternernih sistema koji sadrže metil 1,1-dimetilpropil etar (TAME) i ugljovodonike, Tehnološko-metalurški fakultet, Beograd, 1995. Mentor: Dr Dušan Grozdanić, redovni profesor, Tehnološko-metalurški fakultet, Beograd.

22.03.2011 – Na sednici Nastavno-naučnog veća Tehnološko-metalurškog fakulteta doneta je Odluka o odobravanju predloga teme doktorske disertacije mr Anđele Knežević Stevanović, dipl.inž. pod nazivom: "Eksperimentalno određivanje i modelovanje volumetrijskih svojstava, indeksa refrakcije i viskoznosti višekomponentnih sistema organskih rastvarača", a za mentora ove doktorske disertacije imenovana je dr Mirjana Kijevčanin, redovni profesor TMF.

04.04.2011 – Na sednici Veća naučnih oblasti tehničkih nauka Univerziteta u Beogradu data je saglasnost na predlog teme doktorske disertacije mr Anđele Knežević Stevanović, dipl. inž., pod nazivom: "Eksperimentalno određivanje i modelovanje volumetrijskih svojstava, indeksa refrakcije i viskoznosti višekomponentnih sistema organskih rastvarača".

31.01.2013. – Na sednici Nastavno-naučnog veća Tehnološko-metalurškog fakulteta doneta je Odluka o imenovanju članova Komisije za ocenu i odbranu doktorske disertacije mr Anđele Knežević Stevanović, dipl. inž., pod nazivom: "Eksperimentalno određivanje i modelovanje volumetrijskih svojstava, indeksa refrakcije i viskoznosti višekomponentnih sistema organskih rastvarača".

1.2. Naučna oblast disertacije

Istraživanja u okviru ove doktorske disertacije pripadaju naučnoj oblasti Hemija i Hemijska tehnologija (uža oblast Hemijsko inženjerstvo) za koju je matična ustanova Tehnološko-metalurški fakultet Univerziteta u Beogradu. Mentor dr Mirjana Kijevčanin, red.prof. TMF-a je do sada iz ove oblasti publikovala više od 50 radova u časopisima koji su na SCI listi, rukovodila izradom tri odbranjene doktorske disertacije, jedne magistarske teze i bila član dve komisije odbranih doktorskih disertacija. Na osnovu dosadašnjeg iskustva, smatramo da je mentor kompetentan da rukovodi izradom ove disertacije.

1.3. Biografski podaci o kandidatu

Andela Knežević-Stevanović je rođena 29.05.1965. godine u Beogradu, Srbija. Završila je osnovnu školu „Žarko Zrenjanin” i Prvu beogradsku gimnaziju sa odličnim uspehom. Nosilac je Vukove diplome. Tehnološko-metalurški fakultet upisala je 1983. godine. Diplomirala je na Odseku za Hemijsko inženjerstvo 1990. godine sa prosečnom ocenom u toku studija 8,27 odbranivši svoj diplomski rad sa ocenom 10. U toku studija boravila je na profesionalnoj praksi u Švedskoj, u kompaniji SAB NIFE AB, Oskarshamn. Poslediplomske magistarske studije upisala je 1991. na Tehnološko-metalurškom fakultetu u Beogradu na Odseku za Hemijsko i biohemijsko inženjerstvo. U toku 1994. i 1995. godine boravila je na Odseku za Hemijsko inženjerstvo Univerziteta u Otavi, Kanada. 1995. godine uspešno je odbranila magistarsku tezu na Tehnološko-metalurškom fakultetu i stekla zvanje magistra tehničkih nauka Univerziteta u Beogradu.

Od 1991. do 1995. godine radila je kao asistent-pripravnik i asistent na Katerdi za Hemijsko inženjerstvo Tehnološko-metalurškog fakulteta u Beogradu. Od 1995. godine radi u Kanadi. 1995-1996 radila je kao dizajn/projekt inženjer kompanije Camillus Engineering Consultants Ltd., 1997. kao inženjer za zaštitu životne sredine provincijske vlade Severozapadnih teritorija, 1997-1999 kao inženjer zaštite životne sredine u kompaniji Dillon Consulting Ltd. u Vankuveru. Od 1999-2004 bila je zaposlena u Ministarstvu za zaštitu životne sredine provincije Britanska Kolumbija kao senior inženjer za zaštitu životne sredine, a od 2004-2009 u istom ministarstvu kao šef odseka za industrijski i opasni otpad i havarije. Od 1999. do 2009. bila je predavač po pozivu Univerziteta severna Britanska Kolumbija i Univerziteta Ostrvo Vankuver, kao i redovni predavač na godišnjim seminarima laboratorija Envirotech Labs i Northwest Laboratories (Bodycote) u Alberti i Britanskoj Kolumbiji. Nosilac je dva priznanja za doprinose u unapređenju rada Ministarstva i specijalne nagrade Ministra za zaštitu životne sredine Britanske Kolumbije za uspešno izvedene projekte. Od 2009. godine radi za Regionalnu vladu vankuerske oblasti na poziciji menadžera odseka za zaštitu životne sredine.

2006. godine registrovala se kao profesionalni inženjer Udruženja profesionalnih inženjera Britanske Kolumbije, licenca br. 30377. Od 2007. član je Izvršnog odbora Udruženja.

2. OPIS DISERTACIJE

2.1. Sadržaj disertacije

Doktorska disertacija mr Anđele Knežević Stevanović napisana je na 221 strane (i 213 strana u prilogima), u okviru kojih se nalazi 7 poglavlja, sa ukupno 53 slike (i 8 u prilogu C), 36 tabela (i 36 u Prilogu B) i 111 literaturna navoda. Doktorska disertacija ima sledeća poglavlja: Uvod, Teorijska razmatranja - Termodinamička i termofizička svojstva višekomponentnih sistema, Eksperimentalni deo, Rezultati eksperimentalnih merenja, Modelovanje termodinamičkih i transportnih svojstava, Zaključke i Literaturu, kao i Izvode na srpskom i engleskom jeziku. U tezi postoje i tri priloga u kojima su dati Tehnika eksperimentalnog rada (Prilog A), Tabele (Prilog B) i Slike (Prilog C).

2.2. Kratak prikaz pojedinačnih poglavlja

U uvodu je istaknut značaj eksperimentalnog određivanja termodinamičkih i termofizičkih parametara čistih fluida i njihovih smeša, zatim značaj određivanja izvedenih volumetrijskih svojstava, dopunskih veličina i promena termodinamičkih i transportnih svojstava, kao i razvijanja modela za njihovo korelisanje, predviđanje i međusobno povezivanje.

U okviru poglavlja Teorijska razmatranja - Termodinamička i termofizička svojstva višekomponentnih sistema, dati su izrazi za proračun termodinamičkih veličina, dopunske molarne zapremine V^E , promene indeksa refrakcije Δn_D i promene viskoznosti $\Delta \eta$ smeša, koje se određuju na bazi eksperimentalno izmerenih veličina: gustina, indeksa refrakcije i viskoznosti binarnih i višekomponentnih smeša.

U Eksperimentalnom delu izvršen je izbor čistih fluida i višekomponentnih sistema za analizu, imajući u vidu da odabrani sistemi budu značajni sa industrijskog i ekološkog aspekta, ali da pri mešanju ovih komponenata ne dolazi do hemijskih reakcija. Takođe, komponente koje su analizirane su međusobno različite i složene strukture i prilikom njihovog mešanja dolazi do formiranja međumolekulskih veza i do prostornog pakovanja molekula, koje uslovljavaju manje ili veće odstupanje od idealnosti. U okviru ovog poglavlja date su osnovne karakteristike aparata: digitalnog gustomera Anton Paar DMA 5000, refraktometra Anton Paar RXA 156 i viskozimetra SVM 3000, koji su korišćeni za određivanje gustina, indeksa refrakcije i viskoznosti čistih komponenata, binarnih i ternarnih smeša pri atmosferskom pritisku i u širokom temperaturnom intervalu.

U poglavlju Rezultati eksperimentalnih merenja dati su rezultati merenja gustine, indeksa refrakcije i viskoznosti, kao i vrednosti za dopunsku molarnu zapreminu, promenu indeksa refrakcije i promenu viskoznosti ispitivanih smeša. Za analizu je odabrano osam binarnih i četiri ternarna sistema estra (dimetiladipat) sa alkoholima (1-butanol i 2-butanol), alifatičnim ketonom (2-butanon) i cikličnim etrom (tetrahidrofuran): dimetiladipat + 1-butanol, dimetiladipat + 2-butanol, dimetiladipat + 2-butanon, dimetiladipat + tetrahidrofuran, 2-butanon + 1-butanol, 2-butanon + 2-butanol, tetrahidrofuran + 1-butanol, tetrahidrofuran + 2-butanol, dimetiladipat + 2-butanon + 1-butanol, dimetiladipat + 2-butanon + 2-butanol, dimetiladipat + tetrahidrofuran + 1-butanol i dimetiladipat + tetrahidrofuran + 2-butanol. Meranja su obuhvatila celokupni koncentracioni opseg i izvršena su na atmosferskom pritisku u temperaturnom intervalu od 288.15 K do 323.15 K. Ovakav izbor sistema i uslova merenja ne samo da je pružio mogućnost proširenja baze eksperimentalnih podataka pomenutih termodinamičkih i termofizičkih svojstava, nego je takođe omogućio ispitivanje uticaja strukture molekula (broja ugljenikovih atoma u nizu i položaja funkcionalnih grupa u molekulu) na promenu svojstava rastvora, prisustvo specifičnih hemijskih i fizičkih interakcija. Pored definisanja uzroka i faktora koji su doprineli neidealnom ponašanju

smeša (vodonične i van der Waalsove veze, efekti pakovanja, itd.), poseban osvrt je dat i na uticaj temperature na ponašanje pomenutih sistema. Za potrebe obrade eksperimentalnih podataka, korelisanje i predviđanje dopunske zapremine i viskoznosti, kao i za predviđanje indeksa refrakcije iz dopunske zapremine smeša, korišćeni su modeli razvijeni u programskom jeziku Fortran.

Uspostavljanje rigoroznih termodinamičkih modela pomoću kojih se opisuju dopunske veličine je od primarnog značaja za projektovanje i maseno, energetsko i eksergetsko bilansiranje mnogih separacionih i drugih industrijskih procesa. Međutim, teorijskim pristupima često nije moguće obuhvatiti sve efekte koji karakterišu složene sisteme, pa se poluempirijskim i empirijskim modelima, koji često sadrže čitav niz parametara, mogu prevazići ograničenja koja proizilaze iz teorije. Korelisanje i predviđanje svojstava višekomponentnih sistema pomoću modela i metoda zasnovanih na karakteristikama binarnih komponenata koje ih sačinjavaju predstavlja aktuelnu oblast u okviru opštih istraživanja termodinamike tečnog stanja. U poglavlju Modelovanje termodinamičkih i transportnih svojstava uspostavljene su osnovne jednačine na kojima su bazirani modeli za korelisanje i predskazivanje V^E , Δn_D i $\Delta \eta$ podataka eksperimentalno obrađivanih sistema. Za uporednu analizu su korišćena dva tipa modela: (i) empirijski modeli polinomskeg tipa (Radojković, Kohler, Jacob-Fitzner, Colinet, Tsao-Smith, Toop, Scatchard i Rastogi) i (ii) poluempirijski modeli bazirani na Peng-Robinson-Stryjek-Vera kubnoj jednačini stanja (PRSV CEOS) i van der Waals jedan fluid pravila mešanja (vdW1) i modeli bazirani na PRSV CEOS i dopunskoj Gibbsovoj energiji (G^E) - CEOS/ G^E modeli. Pored toga, date su osnovne jednačine na bazi kojih je izvršeno izračunavanje indeksa refrakcije smeša iz indeksa refrakcije čistih komponenti, kao i predviđanje V^E iz podataka za indekse refrakcije smeša pomoću najčešće korišćenih pravila mešanja: Lorentz-Lorenz, Dale-Gladstone, Eykman, Arago-Biot, Newton i Oster pravila mešanja.

U poglavlju Zaključci dati su sumirani zaključni komentari rezultata dobijenih u ovoj tezi uz obrazloženje njenog naučnog doprinosa. Na kraju glavnog dela disertacije navedena je Literatura, koja sadrži sve korišćene reference.

Nakon referenci dati su prilozi sa opisom tehnika eksperimentalnog rada (Prilog A), tabele (Prilog B) i Slike (Prilog C) sa prikazanim rezultatima eksperimentalnih merenja i modelovanja termodinamičkih i transportnih svojstava.

3. OCENA DISERTACIJE

3.1. Savremenost i originalnost

Eksperimentalno određivanje termofizičkih parametara fluida, kao i razvijanje termodinamičkih modela za njihovo predviđanje, korelisanje i međusobno povezivanje predstavljaju aktuelna istraživačka polja u savremenoj literaturi koja se bavi hemijsko-inženjerskom termodinamikom. Takođe, izborom višekomponentnih smeša prati se savremeni trend ispitivanja mogućnosti upotrebe „zelenih“ rastvarača, odnosno zamene toksičnih, zatim ispitivanje uticaja strukture molekula (broja ugljenikovih atoma u nizu i položaju funkcionalnih grupa u molekulu) na promenu karakteristika rastvora, kao i prisustvo specifičnih hemijskih i fizičkih interakcija.

3.2. Osvrt na referentnu i korišćenu literaturu

U toku izrade doktorske disertacije kandidatkinja je detaljno istražila literaturu vezanu za predloženu tematiku, a zatim koristila literaturu koja je referentna za istraživanja u oblasti eksperimentalnog određivanja i modelovanja volumetrijskih svojstava, indeksa refrakcije i

viskoznosti višekomponentnih sistema organskih rastvarača. Pored radova koji predstavljaju osnovu za eksperimentalne tehnike i modele koji su u disertaciji primenjeni, kandidatkinja je deteljno istražila najnovije naučne radove koji se bave trendovima upotrebe novih organskih rastvarača u industrijskim procesima. Korišćenje novije literature omogućilo je da se usvoje savremeni pristupi u analizi podataka i rezultata datih u disertaciji.

3.3. Opis i adekvatnost primenjenih naučnih metoda

Eksperimentalna istraživanja izvršena su merenjem gustine na digitalnom gustomeru tipa Anton Paar DMA 5000, preciznosti $10^{-6} \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ i tačnosti $5\times 10^{-5} \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$. Indeks refrakcije je određen pomoću Anton Paar RXA 156 refraktometra, preciznosti 2×10^{-5} . Viskoznost je merena pomoću viskozimetra SVM 3000, preciznosti 1×10^{-4} . Obrada eksperimentalnih podataka, korelisanje i predviđanje dopunske zapremine i viskoznosti, kao i za predviđanje dopunske zapremine smeša iz podataka za indekse refrakcije, izvršena je primenom poluempirijskih i empirijskih modela razvijenih u programskom jeziku Fortran, što predstavlja najsavremeniji pristup ovog tipa istraživanja.

Modelovanje volumetrijskih svojstava obuhvatilo je: korelisanje vrednosti V^E binarnih sistema, kao i korelisanje i predviđanje vrednosti V^E ternarnih smeša pomoću Peng-Robinson-Stryjek-Vera kubne jednačine stanja (PRSV CEOS) kombinovane sa modelima za dopunsku Gibbs-ovu energiju (CEOS/G^E) u koje su ugrađena dva pravila mešanja, van der Waals jedan dluid (vdW1) i model razvijen od strane Twu i saradnika (TCBT). Na osnovu vrednosti n_D čistih komponenata, izvršeno je predviđanje vrednosti V^E , kao i predviđanje vrednosti n_D binarnih sistema, korišćenjem Lorentz-Lorentz, Dale-Gladstone, Eykman, Arago-Biot, Newton i Oster pravila mešanja. Izvršen je pregled i testiranje 43 korelativne metode za izračunavanje vrednosti viskoznosti višekomponentnih smeša.

3.4. Primenljivost ostvarenih rezultata

Rezultati ostvareni u okviru ove disertacije imaju veliki značaj kako sa aspekta ispitivanje uticaja strukture molekula (opisivanje ponašanja višekomponentnih smeša, koje je posledica međumolekulskih interakcija i složene molekulske strukture) na promenu veličina rastvora i prisustvo specifičnih hemijskih i fizičkih interakcija, tako i sa praktičnog industrijskog aspekta. Na primer, upotreba adipata rasprostranjena je u industriji boja i lakova, a u novije vreme njegova primena je doživela i veliku ekspanziju u različitim industrijskim procesima, naročito u onima u kojima je potrebno snižavati viskoznost fluida (petrohemijski fluidi i naftne frakcije).

3.5. Ocena dostignutih sposobnosti kandidata za samostalni naučni rad

Kandidatkinja mr Anđela Knežević Stevanović, dipl.inž. je tokom izrade doktorske disertacije pokazala veliku stručnost u pripremi i realizaciji eksperimenata, modelovanju dobijenih rezultata pomoću različitog tipa modela i numeričkih tehnika, kao i analizi dobijenih rezultata. Kandidatkinja je tokom celog toka izrade disertacije pokazala da je sposobna za uspostavljanje i sprovođenje različitih pristupa u istraživanju i da poseduje sve kvalitete koji su neophodni za samostalni naučni rad.

4. OSTVARENI NAUČNI DOPRINOS

4.1. Prikaz ostvarenih naučnih doprinosa

Istraživanja ostvarena u okviru ove doktorske disertacije dala su višestruko značajan naučni doprinos, pri čemu se može izdvojiti sledeće:

- Proširena je baza podataka novim, pouzdanim eksperimentalnim podacima, za industrijski veoma značajne sisteme.
- Određene su vrednosti volumetrijskih veličina, indeksa refrakcije i viskoznosti izabranih sistema.
- Utvrđen je uticaj temperature na vrednosti navedenih termodinamičkih svojstava.
- Definisane su međumolekulske interakcije prisutne u ispitivanim sistemima, što doprinosi boljem razumevanju i objašnjenju pojava u njima.
- Utvrđena je primenljivost različitih termodinamičkih modela (empirijskih i poluempirijskih) za predviđanje, korelisanje i međusobno povezivanje termofizičkih parametara višekomponentnih smeša.
- Određeni su novi interakcioni parametri i unapređeni modeli za određivanje viskoznosti binarnih sistema.

4.2. Kritička analiza rezultata istraživanja

Pre početka istraživanja datih u ovoj tezi izvršen je detaljan pregled literature u cilju adekvatnog izbora sistema koji se koriste u industriji boja i lakova, a kojim se dodavanjem određenih rastvarača mogu kontrolisati termofizičke karakteristike.

S obzirom na to da u industriji postoji velika potreba za zamenom toksičnih i štetnih organskih rastvarača jedinjenjima koja imaju slične procesne karakteristike, ali znatno manje negativne efekte, javio se problem nepostojanja odgovarajućih eksperimentalnih podataka za smeše organskih estara koji imaju značajnu industrijsku primenu (na primer estri adipinske kiseline) i široko primenjivih organskih rastvarača (alkohola i/ili ketona). Pregledom literature utvrđeno je da su termodinamičke veličine ovih sistema veoma malo ispitivane.

Imajući u vidu ovu činjenicu, započeta su eksperimentalna određivanja termofizičkih parametara izabranih fluida i njihovih smeša. Veoma precizna merenja su dovela do proširivanja baza podataka gustina, indeksa refrakcije i viskoznosti, neophodnih za dalju analizu procesa u kojima se ova jedinjenja pojavljuju.

Na osnovu uspostavljene baze podataka eksperimentalno izmerenih veličina, izračunate su vrednosti volumetrijskih veličina, dopunskih termodinamičkih veličina i promena viskoznosti i indeksa refrakcije. Ovako dobijeni podaci su bili osnov za dalju analizu sistema – određivanje specifičnih interakcija i promena koje u sistemima nastaju mešanjem dve ili više komponenata.

Uvid u specifične interakcije dao je osnovu za proširenje termodinamičke analize ovih rastvora i teorije tečnog stanja. S obzirom da su u pitanju bili veoma neidelni sistemi, sa polarnim komponentama, prisutnim vodoničnim vezama itd., veliki doprinos dat u ovoj disertaciji su pouzdano određene inter i intra molekulske interakcije koje vladaju u smešama. Da bi se bolje definisale međumolekulske interakcije, u radu su dati odgovarajući dijagrami promena termodinamičkih i transportnih svojstava sa sastavom i temperaturom. Definisanje međumolekulskih interakcija prisutnih u ispitivanim sistemima, doprinelo je boljem razumevanju i objašnjenju pojava u njima.

Imajući u vidu da se ispitivane termodinamičke i transportne veličine znatno menjaju sa promenom uslova u sistemu, a da je za industrijske procese bitno pratiti i promene na različitim radnim uslovima temperature, u ovoj disertaciji je, izvođenjem eksperimentalnih merenja u širem temperaturnom intervalu, utvrđen uticaj temperature na vrednosti navedenih svojstava.

S obzirom na to da je ispitivan veći broj sistema složene strukture (izuzetno pozitivno ili negativno odstupanje od idealnosti, pojava S oblika krivih dopunske zapremine itd), bilo je moguće testirati različite tipove empirijskih ili poluempirijskih modela, sa različitim brojem parametara. Na osnovu dobijenih rezultata utvrđena je primenljivost različitih termodinamičkih modela za predviđanje, korelisanje i međusobno povezivanje termofizičkih parametara višekomponentnih smeša. Ovim je data osnova za davanje generalnih preporuka za korišćenje određenog tipa modela i pravila mešanja, u zavisnosti od smeša koje se ispituju.

Značajan doprinos ove teze predstavljaju i vrednosti interakcionih parametara koji su određeni za UNIFAC-VISCO model. Ovaj doprinos je naročito značajan s obzirom na to da ovaj model ima veliku primenu u softverima za projektovanje procesa i opreme, a da je za pouzdane rezultate neophodno imati parametre koji su precizno određeni na većem broju sistema.

4.3. Verifikacija naučnih doprinosa

Iz rada na tezi "Eksperimentalno određivanje i modelovanje volumetrijskih svojstava, indeksa refrakcije i viskoznosti višekomponentnih sistema organskih rastvarača" koju je uradila mr Anđela Knežević Stevanović, dipl.inž. objavljeni su sledeći radovi:

Rad u istaknutom međunarodnom časopisu (M22)

2. **A.B. Knežević-Stevanović**, S.P. Šerbanović, B.D. Djordjević, D.K. Grozdanić, J.D. Smiljanić, M.Lj. Kijevčanin, Experimental determination and modeling of densities and refractive indices of the binary mixtures of dimethylphthalate (or dimethyladipate) + 1-butanol, or +2-butanol, or +2-butanone at T = (288.15-323.15) K, *Thermochimica Acta* 533 (2012) 28-38 (IF (2011) = 1.805; ISSN: 0040-6031).

Radovi štampani u međunarodnom časopisu (M23):

3. **A.B. Knežević Stevanović**, G.M.Babić, M.Lj. Kijevčanin, S.P. Šerbanović, D.K. Grozdanić, Correlation of the liquid mixture viscosities, *J. Serb. Chem. Soc.* 77 (2012) 1083–1089 (IF (2011) = 0.879; ISSN: 0352-5139).
4. **A.B. Knežević-Stevanović**, J.D. Smiljanić, S.P. Šerbanović, I.R. Radović, M.Lj. Kijevčanin, Densities, Refractive Indices and Viscosities of the Binary Mixtures of Dimethyl phthalate or Dimethyl adipate with Tetrahydrofuran, *J. Serb. Chem. Soc.* (2013), doi: 10.2298/JSC130407045K (IF (2011) = 0.879; ISSN: 0352-5139).

Saopštenje sa skupa nacionalnog značaja štampano u celini (M63):

1. **A. Knezević Stevanović**, D.Bajić, J.Jovanović, D.Grozdanić, I.Radović, S.Šerbanović, M.Kijevčanin, Temperature influence on change of thermodynamic and transport properties of the binary systems containing dimethylphthalate (or dimethyladipate) and alcohols, str. 73-76 u Zborniku radova sa 49. Savetovanja Srpskog hemijskog društva, Kragujevac, Srbija, 2011.
2. **A.B. Knežević Stevanović**, S.P. Miškov, D.M. Bajić, D.K. Grozdanić, M.Lj. Kijevčanin, Experimental measurements of volumetric properties, refractive index and viscosity of the ternary system dimethyladipate + 2-butanone + 2-butanol, str. 36-40 u Zborniku radova sa 50. Savetovanja Srpskog hemijskog društva, Beograd, Srbija, 2012.

5. ZAKLJUČAK I PREDLOG

Kratak osvrt na disertaciju u celini

Na osnovu svega napred iznetog, Komisija smatra da je doktorska disertacija mr Anđele Knežević Stevanović, dipl.inž., pod nazivom: "Eksperimentalno određivanje i modelovanje volumetrijskih svojstava, indeksa refrakcije i viskoznosti višekomponentnih sistema organskih rastvarača", ostvarila ciljeve istraživanja i da predstavlja značajan i originalni naučni doprinos u oblasti i Hemijska tehnologija (Uža oblast Hemijsko inženjerstvo), što je potvrđeno objavljivanjem radova u časopisima međunarodnog značaja i saopštenja na konferencijama.

Predlog Komisije Nastavno-naučnom veću

Komisija predlaže Nastavno-naučnom veću TMF-a da se doktorska disertacija pod nazivom Eksperimentalno određivanje i modelovanje volumetrijskih svojstava, indeksa refrakcije i viskoznosti višekomponentnih sistema organskih rastvarača kandidatkinje mr Anđele Knežević Stevanović, dipl.inž. prihvati, izloži na uvid javnosti i uputi na konačno usvajanje Veću naučnih oblasti tehničkih nauka Univerziteta u Beogradu, te da nakon završetka ove procedure, pozove kandidatkinju na usmenu odbranu disertacije, pred Komisijom u istom sastavu.

U Beogradu, 11.03.2013.

ČLANOVI KOMISIJE

1. dr Mirjana Kijevčanin, red. prof. TMF
Univerziteta u Beogradu
2. dr Slobodan Šerbanović, red. prof. TMF
Univerziteta u Beogradu
3. dr Dušan Grozdanić, red. prof. TMF u penziji
Univerziteta u Beogradu