

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

Predmet: Podobnost teme i kandidata Nikole Grozdanića, dipl. inž. tehnologije za izradu doktorske disertacije

Odlukom Nastavno-naučnog veća Tehnološko-metalurškog fakulteta br. 35/118 od 22.05.2014. godine, imenovani smo za članove Komisije za ocenu podobnosti teme i kandidata NIKOLE GROZDANIĆA za izradu doktorske disertacije i naučne zasnovanosti teme pod nazivom "EKSPERIMENTALNO ODREĐIVANJE I MODELOVANJE RAVNOTEŽE TEČNOST - TEČNOST VIŠEKOMPONENTNIH SISTEMA ZELENIH RASTVARAČA".

Na osnovu materijala priloženog uz Zahtev kandidata, Komisija podnosi sledeći

REFERAT

1. Podaci o kandidatu

1.1 Biografski podaci

Nikola Grozdanić rođen je 27.02.1982. godine u Beogradu, gde je završio osnovnu školu. Srednje obrazovanje stekao je u Dublin High School, Texas, USA. Na Tehnološko-metalurški fakultet upisao se školske 2001/2002. godine, na odsek za Hemijsko inženjerstvo. Školske 2005/2006. godine bio je na praksi, u trajanju od šest meseci, na Pennsylvania State University, Pennsylvania, USA. Diplomirao je u februaru 2008. godine na Katedri za Hemijsko inženjerstvo sa prosečnom ocenom 8,28 i ocenom 10 sa radom na temu "Primena različitih modela jednačina stanja na proračun parametara ravnoteže para - tečnost" kod mentora dr Mirjane Kijevčanin, red. prof.

Školske 2009/2010. godine upisao se na doktorske studije na Tehnološko-metalurškom fakultetu, studijski program Hemijsko inženjerstvo, pod rukovodstvom mentora dr Slobodana Šerbanovića, red. prof.

1.2 Stečeno naučnoistraživačko iskustvo

U okviru doktorskih studija položio je 11 ispita predviđenih studijskim programom sa prosečnom ocenom 10 i školske 2012/2013. godine odbranio Završni ispit pod nazivom " Eksperimentalno određivanje i modelovanje ravnoteže tečnost-tečnost organskih fluida i jonskih tečnosti " sa ocenom 10, pred komisijom u sastavu dr Slobodan Šerbanović, red. prof, dr Mirjana Kijevčanin, red. prof., i dr Ivona Radović, docent.

Spisak položenih ispita, ostvareni bodovi i ocene na doktorskim studijama:

Predmet	Broj ESPB	Ocena
1. Hemijska kinetika	5	10
2. Viši kurs termodinamike	5	10
3. Odabrana poglavlja matematičke analize	5	10
4. Analogije fenomena prenosa	5	10
5. Specijalna poglavlja prenosa mase	4	10
6. Biomasa kao izvor energije	4	10
7. Površinski aktivne materije	4	10
8. Prenos toplote i energetska integracija	5	10
9. Specijalna poglavlja prenosa toplote	4	10
10. Prečišćavanje otpadnih voda	5	10
11. Numeričke metode u hemijskom inženjerstvu	4	10
12. Završni ispit	30	10
Ukupno	80	10

Od marta 2010. godine uključen je kao istraživač-pripravnik, a zatim i istraživač-saradnik u realizaciji projekta interdisciplinarnih istraživanja koje finansira Ministarstvo nauke i tehnološkog razvoja OI 172063 "Novi industrijski i ekološki aspekti primene hemijske termodinamike na unapređenje hemijskih procesa sa višefaznim i višekomponentnim sistemima ", kojim rukovodi dr Mirjana Kijevčanin, red. prof.

Od školske 2010/2011. godine angažovan je na izvođenju računskih vežbi na predmetu Termodinamika, a od školske 2012/2013. godine angažovan je i na izvođenju računskih vežbi na predmetu Programiranje.

Nikola Grozdanić je koautor 3 rada objavljenih u časopisima međunarodnog značaja (M21-1 rad; M23-2 rada), kao i 7 saopštenja na naučnim skupovima (M34-1 saopštenje; M63-3 saopštenja; M64-3 saopštenja).

Spisak objavljenih naučnih radova i saopštenja

Radovi objavljeni u časopisima međunarodnog značaja - M20

- Rad u vodećem međunarodnom časopisu – M21

1. **N. Grozdanić**, V. Najdanović-Višak, M. Kijevčanin, S. Šerbanović, M. Nunes da Ponte, Z. Višak, Liquid-liquid phase equilibria in nicotine (aqueous) solutions, Fluid Phase Equilibria, 310 (2011) 198-206, ISSN: 0378-3812, (IF=2.139)

- Rad u međunarodnom časopisu – M23

1. **N.D. Grozdanić**, M.Lj. Kijevčanin, Z.P. Višak, D.K. Grozdanić, S.P. Šerbanović, Correlation of liquid-liquid equilibria of non-ideal binary systems using the non-

- random, two-liquid model, J. Serb. Chem. Soc., 78 (6) (2013) 865-872, ISSN: 0352-5139, (IF=0.912)
2. **N.D. Grozdanić**, M.S. Calado, M.Lj. Kijevčanin, S.P. Šerbanović, Z.P. Višak, Nicotine aqueous solutions: pH-measurements and salting-out effects – Analysis of the effective Gibbs energies of hydration and ionic strengths of the solutions, J. Serb. Chem. Soc, rad prihvaćen, doi:10.2298/JSC130817109G, ISSN: 0352-5139, (IF=0.912)

Zbornici međunarodnih naučnih skupova - M30

- Saopštenje sa međunarodnog naučnog skupa štampano u izvodu - M34

1. A. Abdussalam, G. Ivaniš, **N. Grozdanić**, A. Tasić, I. Radović, M. Kijevčanin, *High pressure density: experimental measurement and modeling*, Proceedings of the 8th International Conference of the Chemical Societies of the South-East European Countries, Belgrade, Serbia 2013.

Zbornici skupova nacionalnog značaja - M60

- Saopštenje sa skupa nacionalnog značaja štampano u celini - M63

1. **N.D. Grozdanić**, M.Lj. Kijevčanin, E. Živković, S.P. Šerbanović, Z.P. Višak, *Ravnoteža tečnost-tečnost u vodenim rastvorima nikotina*, XLVIII savetovanje Srpskog hemijskog društva, Zbornik radova, str. 80-83, Novi Sad 2010.
2. **N.D. Grozdanić**, E. Živković, J. Jovanović, M. Kijevčanin, I. Radović, S. Šerbanović, M. Đuriš, *Odredjivanje viskoznosti binarnih smesa 2-butanol+oktan i 2-metil-2-propanol+oktan*, XLVIII savetovanje Srpskog hemijskog društva, Zbornik radova, str. 112-115, Novi Sad 2010.
3. **N.D. Grozdanić**, *Korelisanje ravnoteže tečno-tečno neidealnih binarnih sistema sa NRTL modelom*, Prvi kongres mladih hemičara Srbije, Zbornik radova, str. 23-26, Beograd 2012.

- Saopštenje sa skupa nacionalnog značaja štampano u izvodu - M64

1. G. Ivaniš, J. Vuksanović, Z. Višak, E. Živković, **N. Grozdanić**, M. Kijevčanin, *Ravnoteža tečnost-tečnost u vodenim rastvorima tečnih polietilen glikola sa toluenom*, XLIX savetovanje Srpskog hemijskog društva, Zbornik radova, str. 44 Kragujevac 2011.
2. **N.D. Grozdanić**, G.R. Ivaniš, Z.P. Višak, S.P. Šerbanović, M.Lj. Kijevčanin, *Correlation of Liquid-liquid Equilibria by NRTL Model*, 50. savetovanje Srpskog hemijskog društva, Zbornik radova, str. 45, Beograd 2012.
3. D. Soldatović, **N. Grozdanić**, J. Vuksanović, I. Radović, S. Šerbanović, M. Kijevčanin, *Ispitivanje ravnoteže čvrsto-tečno PEG 2000 i PEG 35000 u rastvoru anilina i N,N dimetilanilina*, 51. Savetovanje Srpskog hemijskog društva, Zbornik radova, str. 35, Niš 2014.

1.3 Ocena podobnosti kandidata za rad na predloženoj temi

Na osnovu dosadašnjeg rada i pokazanih rezultata tokom doktorskih studija i u okviru naučno-istraživačkog rada na projektu Ministarstva za nauku i tehnološki razvoj Republike Srbije, OI 172063, Nikola Grozdanić, dipl. inž. tehnologije, pokazao je izrazitu sklonost i sposobnost za bavljenje naučno-istraživačkim radom. Takođe, iz same predložene teme disertacije, kandidat je do sada objavio jedan rad u vodećem međunarodnom časopisu M21 i dva rada u međunarodnom časopisu M23, što ukazuje da ispunjava sve potrebne uslove za rad na predloženoj temi doktorske disertacije.

2. Predmet i cilj istraživanja

U industriji se separacija smeša, koje sadrže komponente sličnih temperatura ključanja, obavlja ekstrakcijom uglavnom sa organskim rastvaračima, koji su u većini slučajeva toksični i štetni po zdravlje i okolinu. Poznavanje termodinamičke ravnoteže tečnost - tečnost [1] novih, zelenih rastvarača, veoma je bitno kod ovog procesa, jer pruža mogućnost primene istih kao zamena za stare štetne organske rastvarače.

Jonske tečnosti [2] spadaju u grupu zelenih rastvarača i ekološka su alternativa za klasične (organske) rastvarače kod separacionih procesa. To su soli koje imaju veliki tečni opseg na sobnoj temperaturi, tj. imaju tačku topljenja ispod 100 °C, pri atmosferskim uslovima. Karakteriše ih velika temperaturna stabilnost, nisu toksične i gotovo su neisparljive. Sve ove osobine predstavljaju ove rastvarače kao idealnu zamenu za klasične organske rastvarače.

Predmet naučnog istraživanja je razvoj eksperimentalnih metoda za proučavanje termodinamičkih svojstava ravnoteže tečnost - tečnost, kao i razvoj modela za predviđanje ovih osobina.

Za proračune termodinamičke ravnoteže tečnost - tečnost koriste se dve metode [3]. Prva metoda je dinamički ili vizuelni način [4], kod kojeg se smeša poznatog sastava, zagrevanjem ili hlađenjem dovodi do stanja zamućenja, što predstavlja početak fazne separacije. Druga metoda je titraciona metoda [5], pri konstantnoj temperaturi, kod koje se čista komponenta titriše drugom do pojave fazne separacije. Na ovaj način dolazi se do faznih dijagrama (temperatura u funkciji od sastava) pri atmosferskom pritisku u različitim temperaturnim opsezima.

Pregledom stručne literature došlo se do zaključka da se za modelovanje eksperimentalnih podataka termodinamičke ravnoteže tečnost - tečnost relativno uspešno koristi više različitih modela, koji su razvijeni na bazi modela za termodinamičku ravnotežu para - tečnost.

U cilju korišćenja izvršenih eksperimentalnih merenja u praksi biće razvijeni odgovarajući modeli za predviđanje tačaka zamućenja. Kvalitet modela biće prvo testiran na literaturnim eksperimentalnim podacima [6,7,8,9,10], a zatim će najbolji modeli biti primenjeni na eksperimentalnim merenjima predviđenim ovom doktorskom tezom. Vrednosti potrebnih parametara u modelima biće određeni pomoću modela koji se zasnivaju na dopunskoj Gibbs-ovoj funkciji, kao što su UNIFAC [11,12], UNIQUAC [13], NRTL [14] itd. U ovoj doktorskoj tezi biće modifikovan NRTL model za ravnotežu para - tečnost kombinovanom primenom globalne optimizacione metode i metode

uniformnog pretraživanja [15], koji je primenljiv na termodinamičku ravnotežu tečnost - tečnost.

Cilj predložene doktorske disertacije predstavlja ispitivanje mogućnosti zamene štetnih organskih rastvarača, koji imaju veliku industrijsku primenu, zelenim rastvaračima radi smanjenja zagađenja životne sredine. U ovoj doktorskoj disertaciji biće ispitivana termodinamička svojstva velikog broja binarnih i ternarnih tečnih smeša, kao i uticaj čvrstih neorganskih soli [16] na termodinamičku ravnotežu tečnost - tečnost. Cilj ovog istraživanja je i formiranje baze eksperimentalnih podataka rastvorljivosti, kao i formiranje odgovarajućeg softverskog paketa.

Značaj ispitivanja termodinamičkih svojstava rastvora zelenih rastvarača, predstavlja i velika primena istih kod ekstrakcije i separacije, kod katalize, bio-katalize i organske sinteze, u biotehnologiji kod prečišćavanja proteina, u elektrohemiji i mnogim drugim procesima.

Literatura

- [1] J. Prausnitz, J. O'Connell, The Properties of Gases and Liquids, McGraw-Hill, New York, 2001.
- [2] C. Trindade, Z. Visak, R. Bogel-Lukasik, E. Bogel-Lukasik, M. Nunes da Ponte, Ind. Eng. Chem. Res., 49, (2010), 4850-4857.
- [3] G. Ivaniš, J. Vuksanović, M. Calado, M. Kijevčanin, S. Šerbanović, Z. Višak, Fluid Phase Equilibria, 316, (2012), 74-84.
- [4] U. Domanska, Fluid Phase Equilibria, 26, (1986), 201-220.
- [5] U. Domanska, A. Marciniak, J. Phys. Chem. B, 108, (2004), 2376-2382.
- [6] H. Matsuda, K. Ochi, K. Kojima, J. Chem. Eng. Data 48 (2003) 184-189.
- [7] H. Higashiuchi, Y. Sakuragi, Fluid Phase Equilibria, 36 (1987) 35-47.
- [8] X. Li, K. Tamura, J. Chem. Thermodynamics 42 (2010) 1478-1484.
- [9] C. Chokradjaroen, X. Li, K. Tamura, J. Chem. Thermodynamics 46 (2012) 72-79.
- [10] L. Casas, A. Tourino, B. Orge, G. Marino, M. Iglesias, J. Tojo, J. Chem. Eng. Data 47 (2002) 887-893.
- [11] R. Santiago, M. Aznar, Fluid Phase Equilibria, 303, (2011), 111-114.
- [12] E. Tritopoulou, G. Pappa, E. Voutsas, I. Economou, D. Tassios, Ind. Eng. Chem. Res., 42, (2003), 5399-5408.
- [13] H. Radfarnia, C. Ghotbi, V. Taghikhani, G. Kontogeorgis, J. Chem. Thermodynamics, 38, (2006), 923-928.
- [14] H. Renon, J. Prausnitz, Ind. Eng. Chem. Process Design Develop. 8 (1969) 413-419.
- [15] L. Lapidus, Digital Computation for Chemical Engineers, McGraw-Hill, New York 1962.
- [16] V. Najdanovic-Visak, J. Lopes, Z. Visak, J. Trindade, L. Rebelo, Int. J. Mol. Science, 8, (2007), 736-748.

3. Polazne hipoteze

Na osnovu detaljnog literaturnog pregleda zaključeno je da su termodinamički podaci za ravnotežno ponašanje savremenih, takozvanih zelenih rastvarača veoma retki. Sa druge strane, imajući u vidu značaj koji će ovi rastvarači imati u industrijskom

razvoju, neophodno je precizno određivanje njihovih termodinamičkih svojstava, ali i izrada modela koji će omogućiti njihovu primenu u savremenim softverskim paketima za modelovanje i simulaciju procesa.

Prvi deo ove doktorske disertacije biće vezan za ispitivanje termodinamičkih karakteristika rastvora, kao i ispitivanje hemijskih veza koje nastaju pri ravnoteži tečnost-tečnost. Takođe, biće ispitivan uticaj dodatka neorganskih soli na termodinamičku ravnotežu tečnost - tečnost. Drugi deo ove doktorske disertacije odnosiće se na primenu postojećih modela, ali i razvijanje novih modela za predviđanje tačaka zamućenja višekomponentnih rastvora zelenih rastvarača.

4. Naučne metode istraživanja

Metode istraživanja obuhvataju eksperimentalna merenja (određivanje termodinamičkih svojstava ravnoteže tečnost – tečnost izabranih sistema), kao i modelovanja u cilju modifikacije postojećih modela radi povećanja njihove efikasnosti.

Eksperimentalna merenja biće izvršena u laboratoriji za termofizičke parametre na Tehnološko-metalurškom fakultetu u Beogradu. Eksperimentalno određivanje tačaka zamućenja binarnih rastvora, kao i pseudo-binarnih rastvora, biće obavljeno na aparaturi za određivanje termodinamičke ravnoteže tečnost - tečnost, a čistoća korišćenih supstanci biće utvrđena eksperimentalnim merenjima njihovih gustina na atmosferskom pritisku na gustomeru Anton Paar 5000, preciznosti 10^{-6} g/cm³ i tačnosti $5 \cdot 10^{-5}$ g/cm³. Sastavi ravnotežnih faza biće određeni interpolacijom podataka tačaka zamućenja korišćenjem funkcije polinoma.

Korelisanjem eksperimentalnih podataka biće izračunate vrednosti parametara modela za predviđanje vrednosti koeficijenata aktivnosti. Obrada eksperimentalnih podataka biće zasnovana na modelima ravnoteže para - tečnost razvijenim u programskom jeziku Fortran. Rezultati dobijeni na ovaj način mogu naći primenu u industriji kod različitih procesa separacije.

5. Očekivani naučni doprinos

Rezultati dobijeni u toku rada na ovoj doktorskoj disertaciji mogu predstavljati značajan naučni doprinos na polju termodinamičke ravnoteže tečnost - tečnost i njene primene kod razdvajanja tečnih komponenti pri procesima ekstrakcije. U okviru istraživanja očekuje se nekoliko naučnih doprinosa:

- Proširivanje fundamentalnog znanja iz oblasti termodinamičke ravnoteže tečnost - tečnost;
- Doprinos boljem razumevanju karakteristika i strukture zelenih rastvarača;
- Proširenje baze podataka novim, pouzdanim eksperimentalnim podacima za zelene rastvarače, kao i njihove smeše, koje su značajne sa aspekta uklanjanja različitih nečistoća i štetnih materija iz tečnih rastvora;
- Doprinos saznanjima o mogućnostima zamene štetnih organskih rastvarača novim ekološkim zelenim rastvaračima;
- Razvoj novih modela za termodinamičku ravnotežu tečnost – tečnost;

- Validacija novih korelacionih i predikcionih modela za termodinamička svojstva višekomponentnih smeša.

6. Plan istraživanja i struktura rada

Očekuje se da će doktorska disertacija imati sledeća poglavlja: *Uvod, Teorijski deo, Eksperimentalni deo, Modelovanje, Rezultati i diskusija, Zaključak, Literatura*.

U poglavlju *Uvod* biće definisani glavni ciljevi disertacije, predmet istraživanja i doprinosi disertacije.

U okviru *Teorijskog dela* doktorske disertacije biće obuhvaćen pregled različitih metoda koje se koriste pri određivanju termodinamičke ravnoteže tečnost - tečnost:

- Dinamička metoda;
- Titraciona metoda.

U *Eksperimentalnom delu* biće uključeni:

- Izbor sistema (zelenih rastvarača) za analizu;
- Planiranje eksperimenata;
- Korišćene hemikalije;
- Metode za određivanje termodinamičke ravnoteže tečnost - tečnost;
- Osnovni principi i način rada aparature za merenje termodinamičke ravnoteže tečnost-tečnost;
- Postupak pravljenja smeša.

Poglavljje *Modelovanje* sadržaće prikaz primenjenih postojećih, kao i novorazvijenih modela kod termodinamičke ravnoteže tečnost - tečnost višekomponentnih sistema.

U poglavlju *Rezultati i diskusija* biće prikazani svi rezultati merenja kao i njihova diskusija. Detaljno će biti prikazani rezultati određivanja tačaka zamućenja višekomponentnih sistema zelenih rastvarača, kao i uticaj dodatka neorganskih soli na termodinamičku ravnotežu tečnost - tečnost. Takođe biće diskutovana i primena različitih modela pri obradi eksperimentalnih podataka.

Na osnovu izvršenih eksperimentalnih merenja, u poglavlju *Zaključak* biće sumirani svi dobijeni rezultati.

Svi citirani navodi, kao i radovi koji su nastali u toku istraživanja i rada na ovoj doktorskoj disertaciji, nalaziće se u poglavlju *Literatura*.

7. Zaključak i predlog

Na osnovu izloženog Komisija smatra da kandidat **NIKOLA GROZDANIĆ**, dipl. inž. ispunjava sve potrebne uslove za rad na predloženoj temi doktorske disertacije. Takođe na osnovu iznetih podataka, Komisija smatra da je tema predložene doktorske disertacije pod naslovom: **"EKSPERIMENTALNO ODREĐIVANJE I MODELOVANJE RAVNOTEŽE TEČNOST - TEČNOST VIŠEKOMPONENTNIH SISTEMA ZELENIH RASTVARAČA"** naučno utemeljena

i da će rezultati ovog rada predstavljati značajan naučni doprinos naučnoj oblasti hemijskog inženjerstva. Istraživanja u okviru ove doktorske disertacije pripadaju naučnoj oblasti Tehnološko inženjerstvo, za koju je matičan Tehnološko-metalurški fakultet Univerziteta u Beogradu. Komisija predlaže Nastavno - naučnom veću Tehnološko - metalurškog fakulteta Univerziteta u Beogradu da kandidatu Nikoli Grozdaniću odobri izradu doktorske disertacije pod navedenim naslovom. Za mentore se predlažu dr. Slobodan Šerbanović, redovni profesor Tehnološko - metalurškog fakulteta u Beogradu i dr Zoran Višak, naučni saradnik, Centro de Química Estrutural, Instituto Superior Tecnico, Universidade de Lisboa.

U Beogradu, 12.06.2014. godine

ČLANOVI KOMISIJE

1. Dr Slobodan Šerbanović, redovni profesor
Univerziteta u Beogradu, Tehnološko - metalurški fakultet
2. Dr Zoran Višak, naučni saradnik,
Centro de Química Estrutural, Instituto Superior Tecnico,
Universidade de Lisboa, Lisboa, Portugal
3. Dr Mirjana Kijevčanin, redovni profesor
Univerziteta u Beogradu, Tehnološko - metalurški fakultet
4. Dr Ivona Radović, vanredni profesor
Univerziteta u Beogradu, Tehnološko - metalurški fakultet