

ТЕХНОЛОШКО-МЕТАЛУРШКИ
ФАКУЛТЕТ
35/537
(Број захтева)

УНИВЕРЗИТЕТ У БЕОГРАДУ
ВЕЋЕ НАУЧНИХ ОБЛАСТИ ТЕХНИЧКИХ НАУКА
(Назив већа научне области и коме се захтев упућује)

09.12.2015.
(Датум)

ЗАХТЕВ

за давање сагласности на предлог теме докторске дисертације

Молимо да, сходно члану 46. ст. 5. тач. 3. Статута Универзитета у Београду („Гласник Универзитета“, број 131/06), дате сагласност на предлог теме докторске дисертације:

**„Примена макропорозних смола и материјала на бази целулозе
модификованих оксидима гвожђа за уклањање арсена“**
(пун назив предложене теме докторске дисертације)

НАУЧНА ОБЛАСТ: ХЕМИЈА И ХЕМИЈСКА ТЕХНОЛОГИЈА

ПОДАЦИ О КАНДИДАТУ:

1. Име, име једног од родитеља и презиме кандидата:

Мр KHALED (Ahmed Ali) TALEB, дипл. инж.

2. Назив и седиште факултета на коме је стекао високо образовање: /

3. Година дипломирања: /

4. Назив магистарске тезе кандидата: **„Бакар(II) N-(п-алкил) салицилалдимин хелати
као адитиви композитних материјала“.**

5. Назив факултета на коме је магистарска теза одбрањена: **Универзитет у Београду,
Технолошко-металуршки факултет**

6. Година одбране магистарске тезе: **2005.**

Обавештавамо Вас да је **Наставно-научно веће,**
(назив надлежног тела Факултета)

на седници одржаној **03.12.2015. године** размотрило предложену тему и закључило да је
тема подобна за израду докторске дисертације.

ДЕКАН ФАКУЛТЕТА

Проф. др Ђорђе Јанаћковић

Прилог:

1. Предлог теме докторске дисертације са образложењем
2. Акт надлежног тела факултета о подобности теме за израду докторске дисертације
3. Подаци о ментору.

ДП

На основу чл. 128. Закона о високом образовању и чл. 129. Статута ТМФ-а, на седници Наставно-научног већа Технолошко-металуршког факултета од 03.12.2015. године, донета је

О Д Л У К А
о прихватању Реферата Комисије за оцену подобности теме и кандидата
за израду докторске дисертације

Прихвата се Реферат Комисије за оцену подобности теме и кандидата и одобрава израда докторске дисертације **mr KHALED-a (Ahmed Ali) TALEB-a**, дипл. инж., под називом: **„Примена макропорозних смола и материјала на бази целулозе модификованих оксидима гвожђа за уклањање арсена“**

Одлуку о давању сагласности на предлог теме докторске дисертације доноси Универзитет у Београду.

За ментора се одређује **др Александар Маринковић**, доцент Универзитета у Београду, Технолошко-металуршки факултет.

Одлуку доставити: Универзитету у Београду на сагласност, кандидату, ментору, Служби за наставно студентске послове и архиви Факултета.

Д Е К А Н

Проф. др Ђорђе Јанаћковић

ПОДАЦИ О МЕНТОРУ

за кандидата: Khaled Taleb

Име и презиме ментора: Александар Маринковић

Звање: доцент

Списак радова који квалификују ментора за вођење докторске дисертације:

1. Taleb K., Markovski J., Milosavljević M., Marinović-Cincović M., Rusmirović J., Ristić M., **Marinković A.**: *Efficient arsenic removal by cross-linked macroporous polymer impregnated with hydrous iron oxide: Material performance*, - Chemical Engineering Journal, Vol 279, 2015, pp. 66–78; ISSN: 1385-8947; IF(2014)=4.321; doi:10.1016/j.cej.2015.04.147,
2. G. D. Vuković, **A. D. Marinković**, M. Čolić, M. D. Ristić, R. Aleksić, A. A. Perić-Grujić, P. S. Uskoković. "Removal of cadmium from aqueous solutions by oxidized and ethylenediamine-functionalized multi-walled carbon nanotubes", - Chemical Engineering Journal, Vol. 157, 2010, pp. 238-248; ISSN: 1385-8947; IF (2010) = 3.074; doi:10.1016/j.cej.2009.11.026,
3. G. D. Vuković, **A.D. Marinković**, S. D. Škapin, M. Đ. Ristić, R. Aleksić, A. A. Perić-Grujić, P. S. Uskoković, "Removal of lead from water by amino modified multi-walled carbon nanotubes", - Chemical Engineering Journal, Vol. 173, 2011, pp. 855–865 [doi:10.1016/j.cej.2011.08.036](https://doi.org/10.1016/j.cej.2011.08.036); ISSN: 1385-8947; IF (2011) = 3.461,
4. N. Ben Issa, V. N. Rajaković-Ognjanović, **A. D. Marinković**, Lj. V. Rajaković, "Separation and determination of arsenic species in water by selective exchange and hybrid resins", Analytica Chimica Acta, Vol. 706, 2011, pp. 191–198, ISSN: 0003-2670; IF (2011) = 4.555; ([doi:10.1016/- j.aca.2011.08.015](https://doi.org/10.1016/j.aca.2011.08.015),
5. J. S. Markovski, V. R. Đokić, M. Milosavljević, M. Mitrić, A. A. Perić-Grujić, A. E. Onjia, **A. D. Marinković**, "Ultrasonic assisted arsenate adsorption on solvothermally synthesized calcite modified by goethite, α -MnO₂ and goethite/ α -MnO₂", Ultrasonic Sonochemistry, Vol. 21, 2014, pp. 790-801; ISSN 1350-4177; IF (2014) = 3.516; doi:10.1016/j.ultsonch.2013.10.006.

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 односно 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: 03.12.2015.

М.П.

Проф. др Ђорђе Јанаћковић

NASTAVNO-NAUČNOM VEĆU

Predmet: Podobnost teme i kandidata Khaleda Taleba za izradu doktorske disertacije

Odlukom Nastavno-naučnog veća Tehnološko-metalurškog fakulteta Univerziteta u Beogradu br. 35/380 od 23.09.2015. godine, imenovani smo za članove Komisije za ocenu podobnosti teme i kandidata Khaleda Taleba za izradu doktorske disertacije i naučne zasnovanosti teme „**Primena makroporoznih smola i materijala na bazi celuloze modifikovanih oksidima gvožđa za uklanjanje arsena**“.

Na osnovu materijala priloženog uz Zahtev kandidata, Komisija podnosi sledeći

REFERAT

1. Podaci o kandidatu

1.1. Biografski podaci

Khaled Ahmed Taleb je rođen 7.10.1970. godine u Tripoliju, Libija, gde je završio osnovno obrazovanje. Osnovne studije na Fakultetu tehničkih nauka, Univerziteta Tripoli, upisao je 1994/1995. Diplomski rad pod nazivom "*Cementation factor*" odbranio je 2004/2005 godine na katedri za Hemiju, Fakultet za inženjerstvo, Univerzitet u Tripoliju. Magistarske studije je upisao 2004/2005 godine na Tehnološko-metalurškom fakultetu Univerziteta u Beogradu. Magistarsku tezu pod naslovom „Copper(II)-N-(n-alkyl)salicylalimine chelates as additives for composite materials“ odbranio je 2005. godine na Tehnološko-metalurškom fakultetu Univerziteta u Beogradu. Školske 2013/14 započeo je izradu doktorske disertacije na Tehnološko-metalurškom fakultetu Univerziteta u Beogradu, studijski program Hemija i hemijska tehnologija. Oblast naučno-istraživačkog rada Khaled Taleba obuhvata sintezu, karakterizaciju i ispitivanje svojstava novih adsorbenata za uklanjanje arsena iz vode. Khaled Taleb je do sada objavio jedan rad sa SCI liste kategorije M21. Osim toga, Khaled Taleb govori engleski jezik, poznaje rad na računaru, kao i na instrumentima koji se koriste za karakterizaciju sintetisanih adosrbenata (FTIR, Raman, XRD, SEM, TEM, BET i određivanja površinskih svojstava materijala).

1.2. Stečeno naučno-istraživačko iskustvo

Oblast naučno-istraživačkog rada Khaleda Taleba obuhvata razvoj i optimizaciju postupaka dobijanja novih adsorbenata za uklanjanje arsena iz prirodnih voda. Ispitivani sistemi bi omogućili sagledavanje uticaja različitih parametara procesa na efikasnost uklanjanja arsena bez prisustva drugih jona ili pri uklanjanju iz višekomponentnih sistema. Na taj način se izводе zaključci o značaju pojedinih parametara procesa na efikasnost adsorpcije i kompeticije između različitih elemenata. Istraživanja obuhvaćena predloženom temom doktorske disertacije odnose se na različite metode funkcionalizacije nanoceluloze, mikroceluloznih vlaknastih i makroporoznih umreženih smola, koje se u narednom koraku

modifikuju oksidima gvožđa, kao što su getit i magnetit, primenom kontrolisane sinteze/taloženja i postupaka formiranja nanohibridnog sloja na površini nosača. Tokom istraživanja koja se odnose na tezu doktorske disertacije kandidat je ovladao metodama sinteze makroporoznih smola, izolovanja i prečišćavanja nanoceluloze, kao i metodama modifikovanja iste i vlaknaste celuloze, sinteze makroporoznih umreženih smola i metodama modifikacije u cilju uvođenja terminalnih amino grupa, metodama kontrolisanog modifikovanja/taloženja dobijenih supstrata sa magnetitom/getitom, metodama karakterizacije dobijenih adsorbenata pre i posle adsorpcije. Takođe se bavio modelovanjem procesa uklanjanja arsena adsorpcijom: određivanje kapaciteta, kinetičkih i termodinamičkih parametara procesa, ispitivanjem desorpcije, uticaja prisutnih jona na efikasnost uklanjanja arsena, modelovanjem primenom programskih paketa, ispitivanjem performansi adsorbenata u koloni, primenom tehno-ekonomske analize u cilju analize mogućnosti komercijalnog korišćenja materijala. Na osnovu do sada ostvarenih rezultata kandidat Khaled Taleb je publikovao jedan rad u časopisu međunarodnog značaja (M21 – 1 rad) koji se odnosi na oblast istraživanja kojoj pripada predložena tema doktorske disertacije. Takođe je koautor 2 rada na međunarodnim konferencijama na kojima su prikazani rezultati iz teze kandidata.

BIBLIOGRAFIJA NAUČNIH I STRUČNIH RADOVA

1.2.1. Radovi objavljeni u časopisima međunarodnog značaja – M20

Rad u vrhunskom međunarodnom časopisu– M21

1. **Taleb K.**, Markovski J., Milosavljević M., Marinović-Cincović M., Rusmirović J., Ristić M., Marinković A.: *Efficient arsenic removal by cross-linked macroporous polymer impregnated with hydrous iron oxide: Material performance*, - Chemical Engineering Journal, Vol 279, 2015, pp. 66–78; ISSN: 1385-8947 (IF=4.321); doi:10.1016/j.cej.2015.04.147

1.2.2. Predavanje po pozivu na međunarodnom skupu štampano u izvodu M32 (M32=1,5)

1. Markovski J., **Taleb K.**, Rančić M., Marinković A.: *Ultrasonically enhanced synthesis and adsorption/desorption properties of novel micro-nano structured cellulose based material for arsenate removal*, Ultrasonics 2014, Caparica, Portugal, 2014, pp. 122, ISBN 978-989-98793-1-7.

2. **Taleb, K.**, Markovski, J., Hristovski K.D., Rajaković-Ognjanović, V.N., Marinković, A.: *Goethite nanoparticles impregnated cross-linked macroporous polymer for arsenic removal: full-scale system modeling*, 250 American Chemical Society National Meeting, Boston, August 17, 2015.

1.3. Ocena podobnosti kandidata za rad na predloženoj temi

Na osnovu dosadašnjeg rada i ostvarenih rezultata tokom izrade doktorske disertacije, Khaled Taleb je pokazao izuzetnu sklonost i sposobnost za bavljenje naučno-istraživačkim radom. Posebno se istakao u samostalnom kreiranju i realizaciji istraživanja vezanih za temu doktorske disertacije. Do sada je objavio jedan rad u vrhunskom međunarodnom časopisu koji pripada oblasti istraživanja prijavljene teme i na kome je prvi autor i 2 saopštenja na međunarodnim skupovima koji su prezentovani na prestižnim konferencijama. Na osnovu prikazanog Komisija smatra da kandidat ispunjava sve uslove za rad na predloženoj temi doktorske disertacije.

2. Predmet i cilj istraživanja

Prisustvo arsena u vodi je problem svetskih razmera zbog čega je uvek aktuelna problematika, i izazov za inženjere i naučnike, koja se odnosi na osvajanje novih metoda/tehnologija za efikasno uklanjanje arsena iz prirodnih i otpadnih voda. Opsežna istraživanja o štetnom uticaju arsena na ljudsko zdravlje ukazala su na neophodnost smanjenja vrednosti maksimalno dozvoljene koncentracije arsena u vodi za piće sa 50 $\mu\text{g/L}$ na 10 $\mu\text{g/L}$, a koje su propisala regulatorna tela, uključujući Američku agenciju za zaštitu životne sredine, Svetsku zdravstvenu organizaciju, kao i važeći Pravilnik o higijenskoj ispravnosti vode za piće u Republici Srbiji.

Uklanjanje arsena iz vode umnogome zavisi od oblika arsena u kome je prisutan u životnoj sredini i od njegove mobilnosti. Postoji veliki broj tehnika koje su razvijane, neke od njih su tradicionalne metode koje se koriste u tehnologiji pripreme/prerade voda, a kojima se uklanja arsen zajedno sa drugim zagađujućim materijama.

Među komercijalno dostupnim metodama/tehnologijama su: koagulacija i flokulacija, adsorpcija i jonska izmena, membranska filtracija, procesi precipitacije, kao i biološke, elektrohemijske i tehnike koje koriste energiju sunčevog zračenja [1]. Adsorpcija zauzima posebno mesto, zbog svoje jednostavnosti, efikasnosti, ekonomičnosti i fleksibilnosti [2, 3]. Adsorpcija je separaciona tehnika koja se koristi za uklanjanje arsena zbog značajnih povoljnosti, kao što su: mogućnost postizanja visokog kapaciteta, selektivnost, kinetika i mogućnosti primene u velikom broju ciklusa adsorpcije/desorpcije. U novijoj praksi se adsorpcija najčešće vezuje za upotrebu polimernih materijala i nanočestica, koje zahvaljujući razvijenoj specifičnoj površini, a samim tim i velikom broju reaktivnih funkcionalnih grupa, ostvaruju visok kapacitet adsorpcije pri tretmanu vode namenjene ljudskoj upotrebi.

Kao rezultat afiniteta i selektivnosti raznih vrsta oksida metala ka arsenu, značajan broj naučnih radova razmatra jedinjenja gvožđa [1, 2, 4]. Usled jednostavnosti sinteze oksida gvožđa, ekološke bezbednosti, kao i niske cene koštanja [5-10], više vrsta oksida/oksihidroksida/hidroksida gvožđa, prirodnog ili sintetskog porekla, dobro su poznati adsorbenti za uklanjanje arsena [2, 4]. Predmet brojnih istraživanja predstavljaju getit ($\alpha\text{-FeOOH}$), hematit ($\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$), amorfni hidratizani oksidi gvožđa, maghemit ($\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$), magnetit (Fe_3O_4) i različite kompozitne strukture gvožđe/gvožđe oksida ($\text{Fe@Fe}_x\text{O}_y$) [2]. Getit se izdvaja kao jedan od najstabilnijih oblika u različitim termičkim i pH uslovima sredine, što ga čini najrasprostranjenijim oblikom gvožđe oksihidroksida u prirodi [11]. Dobijanje gvožđe(III)-oksihidroksida u obliku getita na laboratorijskom nivou opisali su u svojim radovima Schwertmann i Cornell [11].

Ukoliko se getit i magnetit sintetišu na nanometarskom nivou, razvijena specifična površina, velika poroznost sa gusto raspoređenim aktivnim mestima, čine ga atraktivnim izborom za primenu u uklanjanju arsena iz vodenih rastvora. Međutim, pored brojnih prednosti koje poseduju materijali nano dimenzija, mali prečnik metalnih nano čestica zahteva impregnaciju u/na poroznu podlogu velike specifične površine, sa ciljem prevazilaženja gubitka aktivnosti usled nastanka aglomeracije [2]. Sa druge strane, dizajn adsorbenta pogodnog za primenu u realnim protočnim pakovanim sistemima zahteva razmatranje i prevazilaženje nedostataka nanomaterijala, kao što su: slaba mehanička svojstva, nizak unutarčestični stepen difuzije i pad pritiska [12, 13]. Shodno tome, primena nanočestica oksida gvožđa sa ciljem uklanjanja arsena u protočnom sistemu zahteva adekvatan izbor podloge u dizajniranju hibridnog

adsorpcionog materijala. Impregnacija nano getita na polimernu osnovu je jedan od najjeftinijih procesa [14]. Makroporozni kopolimeri bazirani na glicidil metakrilatu predstavljaju adekvatni izbor za dobijanje sferičnih čestica, sa mogućnošću promene teksturalnih svojstava i sposobnošću otvaranja epoksidnog prstena u cilju dalje modifikacije, uvođenjem grupa koje imaju značajan afinitet prema gvožđu. Osim toga, materijali bazirani na celulozi, nano i vlaknastom obliku, mogu se na analogan način modifikovati i koristiti za taloženje oksida gvožđa, a razvoj membranskih materijala baziranih na celuloznim vlaknima bio bi logičan nastavak proizvodnje materijala za uklanjanje arsena u realnim uslovima.

U skladu sa navedenim, cilj predložene doktorske teze i istraživanja su usmerena ka dobijanju novih materijala optimalnih adsorpcionih osobina, primenljivih u laboratorijskim i realnim sistemima kroz:

- Sintezu makroporozne funkcionalizovane polimerne osnove razvijene specifične površine sa površinskim funkcionalnim grupama koje imaju visok afinitet ka jonima gvožđa;
- Poboljšanje adsorpcionih svojstava makroporoznog polimera amino funkcionalizacijom i imregnacijom sa nanočesticama oksida gvožđa;
- Izolovanje i modifikaciju nanoceluloze (NC), modifikacija mikrovlakana celuloze (MC) i formiranje hibridne strukture NC/MC kovalentno vezane i funkcionalizovane, takođe amino grupama podložnim za kontrolisano taloženje oksida gvožđa;
- Ispitivanje adsorpcionih svojstava novih materijala u šaržnom i protočnom sistemu;
- Modelovanje procesa adsorpcije primenom različitih modela izoterma, kinetičkih jednačina i jednačina za izračunavanje termodinamičkih parametara procesa, kao i Visual MINTEQ programskog paketa za modelovanje uticaja pH i konkurentnih jona u šaržnom sistemu;
- Modelovanje procesa u protočnom sistemu primenom AdDesignS™ programskog paketa;
- Preliminarna tehno-ekonomska analiza koja će ukazati na isplativost primene adsorbenata.

Procesi adsorpcije se mogu opisati primenom više različitih modela. Programski paket Visual MINTEQ [15] je besplatan softver koji opisuje procese površinskog kompleksiranja, omogućavajući matematičko izračunavanje adsorpcionih parametara. Koristi se i kao uporedna metoda za eksperimentalno dobijene rezultate adsorpcije [3, 15]. Programski paket *Adsorption Design Software for Windows* (AdDesignS™) se koristi za modelovanje procesa na poluindustrijskom nivou nakon verifikacije modela na laboratorijskom nivou.

LITERATURA

- [1] Choong T.S.Y., Chuah T.G., Robiah Y., Gregory Koay F.L., Azni I.: *Arsenic toxicity, health hazards and removal techniques from water: an overview*, - Desalination, Vol 217, 2007, pp. 139–166.
- [2] Ming H., Shujuan Z., Bingcai P., Weiming Z., Lu L., Quanxing Z.: *Heavy metal removal from water/ by nanosized metal oxides: A review*, - Journal of Hazardous Materials, Vol 211-212, 2012, pp. 317-331.
- [3] Veličković Z., Vuković G.D., Marinković A.D., Moldovan M.-S., Perić-Grujić A.A., Uskoković P.S., Ristić M.D.: *Adsorption of arsenate on iron(III) oxide coated ethylenediamine functionalized multiwall carbon nanotubes*, - Chemical Engineering Journal, Vol 181–182, 2012, pp. 174–181.

- [4] Giles D.E., Mohapatra M., Issa T.B., Anand S., Singh P.: *Iron and aluminium based adsorption strategies for removing arsenic from water*, - Journal of Environmental Management, Vol 92, 2011, pp. 3011-3022.
- [5] Taleb K., Markovski J., Milosavljević M., Marinović-Cincović M., Rusmirović J., Ristić M., Marinković A.: *Efficient arsenic removal by cross-linked macroporous polymer impregnated with hydrous iron oxide: Material performance*, - Chemical Engineering Journal, Vol 279, 2015, pp. 66–78.
- [6] Markovski J. S., Marković D. D., Đokić V. R., Mitrić M., Ristić M. Đ., Onjia A. E., Marinković A. D.: *Arsenate adsorption on waste eggshell modified by goethite, α -MnO₂ and goethite/ α -MnO₂*, - Chemical Engineering Journal, Vol 237, 2014, pp. 430-442.
- [7] Markovski J. S., Đokić V. R., Milosavljević M., Mitrić M., Perić-Grujić A. A., Onjia A. E., Marinković A. D.: *Ultrasonic assisted arsenate adsorption on solvothermally synthesized calcite modified by goethite, α -MnO₂ and goethite/ α -MnO₂*, - Ultrasonics Sonochemistry, Vol 21, 2014, pp. 790-801.
- [8] Chen L., Xin H., Fang Y., Zhang C., Zhang F., Cao X., Zhang C., Li X.: *Application of Metal Oxide Heterostructures in Arsenic Removal from Contaminated Water*, - Journal of Nanomaterials, <http://dx.doi.org/10.1155/2014/793610>.
- [9] Nadagouda M. N., Lytle D. A.: *Microwave-Assisted Combustion Synthesis of Nano Iron Oxide/Iron-Coated Activated Carbon, Anthracite, Cellulose Fiber, and Silica, with Arsenic Adsorption Studies*, - Journal of Nanotechnology, doi:10.1155/2011/972486.
- [10] Marie Cooper A., K. D. Hristovski, Möller T., Westerhoff P., Sylvester P.: *The effect of carbon type on arsenic and trichloroethylene removal capabilities of iron (hydr)oxide nanoparticle-impregnated granulated activated carbons*, - Journal of Hazardous Materials, Vol 183, 2010, pp. 381-388.
- [11] Schwertmann U., Cornell R.M.: *Iron Oxides in the Laboratory, Preparation and Characterization*, second ed., WILEY-VCH Verlag GmbH, 2000.
- [12] DeMarco M. J., SenGupta A. K., Greenleaf J. E.: *Arsenic removal using a polymeric/inorganic hybrid sorbent*, - Water Research, Vol 37, 2003, pp 164–176.
- [13] Hristovski K., Westerhoff P., Crittenden J.: *An approach for evaluating nanomaterials for use as packed bed adsorber media: A case study of arsenate removal by titanate nanofibers*, - Journal of Hazardous Materials, Vol 156, 2008, pp 604–611
- [14] Sarkar S., Chatterjee P. K., Cumball L. H., SenGupta A. K.: *Hybrid ion exchanger supported nanocomposites: Sorption and sensing for environmental applications*, - Chemical Engineering Journal, Vol 166, 2011, pp 923–931
- [15] Gustafsson J.P., Visual MINTEQ 3.0, beta, <http://www.lwr.kth.se/English/OurSoftware/vminteq/index.htm>. Stockholm, Sweden, 2011.

3. Polazne hipoteze

Osnovne polazne hipoteze na kojima je zasnovana izrada predložene disertacije:

- Razvijanje novih adsorbenata sa poboljšanim karakteristikama: kapacitet, selektivnost, afinitet, primena u dugom vremenskom periodu eksploatacije, kinetički i termodinamički povoljni procesi adsorpcije, mehanička stabilnost u uslovima primene, koji služe za uklanjanje štetnih polutanata i sa aspekta zaštite životne sredine predstavlja nezaobilazan deo istraživanja u cilju obezbeđivanja čiste pijaće vode;
- Nanostrukturni materijali bazirani na oksidima gvožđa imaju veliki značaj u procesu adsorpcije zahvaljujući razvijenoj specifičnoj površini, velikom afinitetu prema arsenu,

usled prisustva velikog broja funkcionalnih grupa na površini. Savremeni trendovi razvoja novih adsorbenata poboljšanih svojstava su usmereni ka dobijanju makroskopskih materijala koji imaju veliku poroznost, visok afinitet prema oksidima gvožđa, čime se dobija hibridna struktura poboljšanih teksturalnih i morfoloških svojstava.

- Sintezom osnovnog materijala, makroporozne umrežene smole, i modifikacijom celuloze, uvode se amino terminalne funkcionalne grupe koje služe kao centri kristalizacije za kontrolisano taloženje oksida gvožđa. Optimizacijom procesa sinteze, odnosno kontrolom veličine, morfologije i kristalne forme istaloženog oksida gvožđa može se uticati na njihova fizičko-hemijska svojstva, a samim tim i na adsorpciona svojstva.
- Nanostrukturne forme oksida gvožđa pokazuju veliki afinitet ka arsenu građenjem monodentatnih i bidentatnih kompleksa.
- Sinteza hibridnih struktura adsorbenata i način vezivanja jonskih oblika arsena na takve strukture utiče, sa jedne strane, na postizanje dobrih adsorpcionih svojstava, a sa druge, ostvaruje se mogućnost da se koristi u ponovljenim ciklusima adsorpcije/desorpcije. Navedena prednost takvih materijala utiče na životni vek korišćenja adsorbensa, odnosno utiče povoljno na tehno-ekonomski aspekt tehnološkog postupka uklanjanja arsena pri korišćenju sintetisanih adsorbenata;
- Osim arsena, zagađujuće materije iz prirodnih ili antropogenih izvora, u vodi su prisutni i drugi joni i organski polutanti koji značajno utiču na proces adsorpcije i čiji efekat je potrebno ispitati.

4. Naučne metode istraživanja

Predmet istraživanja u okviru doktorske disertacije obuhvata ispitivanja koja se odnose na uklanjanje arsena iz vode primenom makroporozne smole i celuloznih materijala modifikovanih nanočesticama oksida gvožđa, poređenje adsorpcionih sposobnosti materijala i tumačenje uticaja sinteze i modifikacije na krajnja svojstva i mogućnost primene dobijenih materijala. Planom istraživanja i radom na doktorskoj disertaciji je obuhvaćeno:

- Analiza i prikupljanje literature koja se odnosi na problematiku vezanu za prisustvo arsena u vodi za piće, posledice po ljudsko zdravlje i aktuelnu zakonsku regulativu, sa ciljem uvida u potrebu pronalaska novih metoda i materijala optimalnih tehno-ekonomskih svojstava za njegovo uklanjanje;
- Analiza i prikaz postojećih tehnika koje se koriste pri uklanjanju arsena iz vode za piće, sa naglaskom na metodi adsorpcije i najčeće korišćenim adsorbentima;
- Pregled postojećih načina sinteze i modifikacije makroporznihih smola i celuloznih materijala, kao i modifikacije sa oksidima gvožđa, metoda optimizacije i rezultate karakterizacije dobijenih materijala;
- Analiza karakteristika adsorbenata baziranih na makroporoznim smolama i celulozi, modifikovanih nanohibridnim strukturama gvožđe oksida koji se koriste kao adsorbenti za uklanjanje arsena, i predstavljanje dosadašnjih rezultata ostvarenih primenom sličnih materijala modifikovanih oksidima gvožđa;
- Plan eksperimenata adsorpcije u kojima se koriste hibridni materijali dobijeni različitim metodama precipitacije nanočestica gvožđe oksida na modifikovane makroporozne umrežene smole dobijene različitim postupcima sinteze i pogodne modifikacije;
- Karakterizacija materijala na osnovu podataka dobijenih različitim instrumentalnim tehnikama: Brunauer-Emmett-Teller izotermom - BET, difrakcijom X zraka – XRD, infracrvenom spektroskopijom – FTIR, skenirajućom elektronskom mikroskopijom – SEM, transmisijom elektronskom mikroskopijom – TEM, RAMAN spektroskopijom, kao i

određivanjem specifične površine, zapremine pora, definisanjem faznih i strukturnih svojstava i morfologije;

- ICP-MS, indukovano spregnuta plazma sa masenom spektroskopijom će se koristiti za određivanje koncentracije arsena i gvožđa pre i posle adsorpcije;
- Određivanje adsorpcionih izoterma, kinetičkih i termodinamičkih parametara, uticaj pH vrednosti sredine i primenjenog ultrazvuka, kao i pretpostavljanje reakcionog mehanizma;
- Matematičke funkcije greške biće korišćene u svrhu statističke obrade eksperimentalnih rezultata u cilju izbora najboljeg adsorpcionog i kinetičkog modela za opis procesa;
- Rezultati dobijeni korišćenjem programskog paketa Visual MINTEQ će biti korišćeni za analizu uticaja različitih parametara i prisutnih jona u vodi za piće na proces adsorpcije, kao i poređenje sa eksperimentalnim rezultatima;
- Programski paket *Adsorption Design Software for Windows* (AdDesignS™) će se koristiti za modelovanje procesa na poluindustrijskom nivou, nakon verifikacije modela na laboratorijskom nivou;
- Kako bi se potvrdile postavljene hipoteze i ostvarili rezultati koji su definisani temom doktorske disertacije, biće korišćene opšte i posebne naučne metode istraživanja. Od opštih naučnih metoda istraživanja biće primenjene: induktivno i deduktivno zaključivanje, komparacija, analiza i sinteza, apstrakcija i konkretizacija, generalizacija i specijalizacija.

5. Očekivani naučni doprinos

Očekuje se da će rezultati istraživanja u okviru ove doktorske disertacije dati:

- Nove materijale, tj. makroporozne umrežene smole različitih teksturalnih svojstva i površinske funkcionalnosti, koje će imati dobar afinitet prema jonima gvožđa, što će omogućiti kontrolisano taloženje oksida gvožđa;
- Optimalne postupke izolovanja i modifikacija nanoceluloze i mikrofibrilarne celuloze, izgradnje hibridne strukture kovalentno vezane nanoceluloze na mikrocelulozna vlakna i površinske funkcionalnosti koja će omogućiti efikasno taloženje oksida gvožđa, gradeći heterogenu strukturu na površini adsorbenta;
- Optimalne postupke sinteze i površinske modifikacije, kontrolisano taloženje/nanošenje oksida gvožđa u cilju dobijanja materijala koji će imati poboljšana svojstva u pogledu kapaciteta i/ili kinetike adsorpcije i post-procesiranja dobijenih adsorbenata, kako bi se dobili materijali sa poboljšanim adsorpcionim svojstvima za uklanjanje arsena;
- Potpunu karakterizaciju novih, sintetisanih i modifikovanih smola primenom različitih instrumentalnih tehnika: SEM, TEM, XRD, FTIR, RAMAN, pH_{PZC} , BET, itd.;
- Ispitaće se adsorpcione karakteristike dobijenih adsorbenata u šaržnom i protočnom sistemu;
- Analizom ravnotežnih i kinetičkih podataka adsorpcije u šaržnom sistemu, odrediće se adsorpcioni, kinetički i termodinamički parametri, izvršiće se modelovanje procesa primenom softverskog paketa MINTEQ;
- Analizom rezultata dobijenih u protočnom sistemu primenom kolone odgovarajućih dimenzija i modelovanjem procesa primenom programskog paketa *Adsorption Design Software for Windows* (AdDesignS™) omogućiće se projektovanje/modelovanje procesa u većoj razmeri;
- Doprinos saznanjima o međusobnom uticaju svojstava materijala i parametara procesa na efikasnost uklanjanja arsena;
- Izvršiće se preliminarne tehno-ekonomske analize poređenjem sa komercijalnim adsorbentima;

- Bolji pristup u potpunom sagledavanju procesa i sinteze novih materijala na osnovu eksperimentalnih i rezultata modelovanja, koji će imati poboljšana svojstva u uslovima primene.

Takođe se očekuje da će razvijena metodologija omogućiti proaktivno i efikasno vođenje politike zaštite i održivog razvoja u cilju poboljšanja kvaliteta životne sredine.

6. Plan istraživanja i struktura rada

Predmet rada ove doktorske disertacije obuhvata ispitivanje: 1) različitih postupaka funkcionalizacije makroporozne smole, NC i MC, 2) uticaj funkcionalizacije na efektivnost taloženja oksida gvožđa, i 3) mogućnost primene u procesima adsorpcije arsena.

U prvom delu doktorske disertacije optimizovaće se metode sinteze i modifikacije makroporozne smole, izolovanja NC, modifikacije NC i MC, kao i metode taloženja oksida gvožđa, getita i magnetita na funkcionalizovane površine, koje imaju afinitet prema oksidima gvožđa.

Drugi deo doktorske disertacije će se odnositi na ispitivanja i određivanja adsorpcionih karakteristika sintetisanih adsorbenata u odnosu na početni odnos sorbat/adsorbent, pH, temperaturu, vreme, prisustvo drugih jona. Izvršiće se modelovanje primenom različitih izoterma i kinetičkih modela, jednačina za izračunavanje termodinamičkih parametara ravnotežnog stanja, modelovanje uticaja pH i prisutnih jona primenom Visual MINTEQ paketa. Ispitivanjem karakteristika sintetisanih adsorbenata u protočnom sistemu odrediće se karakteristike adsorbenata u dinamičkom sistemu, a modelovanje procesa će se vršiti primenom AdDesignS™ paketa, kako bi se izvršilo projektovanje i sagledala mogućnost korišćenja u realnim sistemima.

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

U poglavlju *Uvod* obradiće se značaj arsena u životnoj sredini i neophodnost njegovog uklanjanja iz prirodnih voda, kao i analiza potencijalne primene dobijenih materijala.

Teorijski deo doktorske disertacije obuhvatiće pregled, u literaturi prikazanih relevantnih istraživanja, vezanih za:

- Hemiju i toksikologiju arsena;
- Materijale i tehnologije prikazane/primenjene za uklanjanje arsena iz prirodnih voda;
- Hemiju, kristalografiju i primenu oksida gvožđa, svojstva i značaj za uklanjanje arsena;
- Dobijanje i svojstva makroporoznih smola, kao i metode funkcionalizacije;
- Pregled metoda primenjivanih za modifikaciju NC i MC;
- Metode funkcionalnije površina makroporoznog polimera, NC i MC;

U *Eksperimentalnom delu* će biti navedeni:

- Materijali korišćeni tokom izrade disertacije;
- Optimizacija metode pripreme adsorbenata i opis optimalnih metoda;
- Eksperimentalni uslovi primenjeni tokom adsorpcionih eksperimenata;
- Opis modela: adsorpcionih izoterma, kinetičkih i termodinamičkih jednačina;
- Opis Visual MINTEQ i AdDesignS™ softvera;
- Metode i uslovi pod kojima je izvršena karakterizacija adsorbenata.

U poglavlju *Rezultati i diskusija* biće prikazani i diskutovani eksperimentalni rezultati dobijeni primenom različitih metoda sinteze i karakterizacije adsorbenata, funkcionalizovane makroporozne smole, kao i NC i MC materijala modifikovanih oksidima gvožđa, getitom i magnetitom:

- strukturne promene na osnovu FTIR i Raman spektroskopije;
- termogravimetrijska metoda određivanja gubitka mase;
- skenirajuća elektronska mikroskopija (SEM) i transmisiona elektronska mikroskopija (TEM)
- kristalografija pomoću X zraka (XRD);
- morfološka i površinska svojstva (pH_{PZC} , BET, itd.),

kao i rezultati adsorpcionih eksperimenata u šaržnom i protočnom sistemu, i analiza primenom različitih modela:

- adsorpcionih izoterma čime će se opisati sistem u stanju ravnoteže;
- kinetičkih modela kako bi se opisala brzina procesa, odredio limitirajući korak ukupnog procesa adsorpcije i odredili aktivacioni parametri;
- određivanje termodinamičkih parametara;
- uticaj prisutnih kompetitivnih jona i procesi desorpcije;
- modelovanje stanja ravnoteže u šaržnom sistemu primenom Visual MINTEQ programa i
- modelovanje procesa primenom AdDesignS™ softvera u protočnom sistemu.

U *Zaključku* će biti sumirani rezultati optimizacije postupaka sinteze adsorbenata, funkcionalizacije i taloženja oksida gvožđa, primene dobijenih adsorbenata u procesima uklanjanja arsena u šaržnom i protočnom sistemu, rezultati modelovanja u šaržnom i protočnom sistemu, kao i tehno-ekonomske analize koja će ukazati na opravdanost primene sintetisanih materijala u praksi. Biće istaknuti zaključci koji daju prikaz uticaja površinske modifikacije smole, nanočestica NC i MC na adsorpcione karakteristike tih materijala, a biće dat i predlog plana budućih istraživanja.

Literatura će sadržati navode citirane u disertaciji, kao i radove proistekle istraživanjem u okviru ove doktorske disertacije.

7. Zaključak i predlog

Na osnovu iznetih podataka o dosadašnjem radu i postignutim rezultatima može se zaključiti da kandidat Khaled Taleb ispunjava sve potrebne uslove za rad na predloženoj temi doktorske disertacije. Takođe na osnovu iznetih podataka, Komisija smatra da je tema predložene doktorske disertacije Khaleda Taleba pod naslovom „**Primena makroporoznih smola i materijala na bazi celuloze modifikovanih oksidima gvožđa za uklanjanje arsena**“, naučno zasnovana i predlaže Nastavno-naučnom veću Tehnološko-metalurškog fakulteta Univerziteta u Beogradu da je prihvati. Istraživanja u okviru ove doktorske disertacije pripadaju naučnoj oblasti Hemija i hemijska tehnologija za koju je matičan Tehnološko-metalurški fakultet Univerziteta u Beogradu. Za mentora se predlaže dr Aleksandar Marinković docent Univerziteta u Beogradu, Tehnološko-metalurški fakultet.

Beograd, 23.11.2015. godine

ČLANOVI KOMISIJE:

dr Aleksandar Marinković, docent
Univerziteta u Beogradu, Tehnološko-metalurški fakultet

dr Mirjana Ristić, redovni profesor
Univerziteta u Beogradu, Tehnološki-metalurški fakultet

dr Aleksandra Perić-Grujić, redovni profesor
Univerziteta u Beogradu, Tehnološko-metalurški fakultet

dr Vladimir Pavlović, redovni profesor
Univerziteta u Beogradu, Poljoprivredni fakultet