

ТЕХНОЛОШКО-МЕТАЛУРШКИ
ФАКУЛТЕТ
35/156
(Број захтева)

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

18.04. 2016.
(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:

„Експериментално одређивање волуметријских и структурних својстава и моделовање смеша незасићених органских једињења“.
(пун назив предложене теме докторске дисертације)

НАУЧНА ОБЛАСТ: ТЕХНОЛОШКО ИНЖЕЊЕРСТВО

ПОДАЦИ О КАНДИДАТУ:

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

МИЛАНА (Милан) ЗАРИЋ, дипл инж.

2. Назив и седиште факултета на коме је стекао високо образовање: Универзитет у Београду, Технолошко-металуршки факултет

3. Година дипломирања: 2010.

6. Назив факултета на коме је магистарска теза одбрањена: /
Студент је уписан на докторске академске студије шк. 2010/2011. године.

Година одбране магистарске тезе: /

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

на седници одржаној 14.04.2016. године размотрило предложену тему и закључило да је тема подобна за израду докторске дисертације.

ДЕКАН ФАКУЛТЕТА

Проф. др Ђорђе Јанаћковић

ПОДАЦИ О МЕНТОРУ

за кандидата Милану Зарић, дипл. инг. технологије

Име и презиме ментора: Др Мирјана Кијевчанин

Звање: Редовни професор Универзитета у Београду, Технолошко-металуршки факултет

Списак радова који квалификују ментора за вођење докторске дисертације:

1. M. M. Zarić, B. Bugarski, **M. Lj. Kijevčanin**, “Interactions of Molecules with *cis* and *trans* Double Bonds: A Theoretical Study of *cis*- and *trans*-2-Butene” ChemPhysChem, 17 (2016) 317-324, **(IF (2014) = 3,419; ISSN: 1439-4235)**.
2. S. Cvetković, T. Kaluđerović, B. Vukadinović, **M. Kijevčanin**, Potentials and Status of Biogas as Energy Source in the Republic of Serbia, Renewable and Sustainable Energy Reviews 31 (2014) 407-416 **(IF (2013) = 5.510; ISSN: 1364-0321)**
3. E.M. Živković, D.M. Bajić, I.R. Radović, S.P. Šerbanović, **M.Lj. Kijevčanin**, Volumetric and viscometric behavior of the binary systems ethyl lactate + 1,2-propanediol, +1,3-propanediol, +tetrahydrofuran and +tetraethylene glycol dimethyl ether. New UNIFAC-VISCO and ASOG-VISCO parameters determination, Fluid Phase Equilibria, 373 (2014) 1-19 **(IF = 2.379, ISSN: 0378-3812)**
4. V.D.Spasojević, B.D. Djordjević, S.P. Šerbanović, I.R. Radović, **M.Lj. Kijevčanin**, Densities, Refractive Indices, Viscosities, and Spectroscopic Study of 1-Amino-2-propanol + 1-Butanol and + 2-Butanol Solutions at (288.15 to 333.15) K, J. Chem. Eng. Data, 59 (2014) 1817-1829 **(IF = 2.004, ISSN: 0021-9568)**
5. J.M.Vuksanovic, M.S.Calado, G.R.Ivanis, **M.Lj.Kijevcanin**, S.P.Serbanovic, Z.P.Visak, Environmentally friendly solutions of liquid poly(ethylene glycol) and imidazolium based ionic liquids with bistriflamide and triflate anions: Volumetric and viscosity studies, Fluid Phase Equilibria 352 (2013) 100-109. **(IF = 2.379, ISSN: 0378-3812)**

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: 15.04.2016.

М.П.

Проф. др Ђорђе Јанаћковић

ДП

На основу чл. 30. став 3. Закона о високом образовању, чл. 40. Статута ТМФ-а и чл. 32. Правилника о докторским студијама ТМФ, на седници Наставно-научног већа Технолошко-металуршког факултета од 14.04.2016. 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 **МИЛАНЕ ЗАРИЋ**, дипл. инж., под називом: **„Експериментално одређивање волуметријских и структурних својстава и моделовање смеша незасићених органских једињења“**.

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

За ментора се одређује др Мирјана Кијевчанин, редовни професор 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

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

Predmet: Podobnost teme i kandidata Milane Zarić, diplomirani inž. tehnologije za izradu doktorske disertacije

Odlukom Nastavno-naučnog veća Tehnološko-metalurškog fakulteta br. 33/99 od 03.3.2016. godine, imenovani smo za članove Komisije za ocenu podobnosti teme i kandidata MILANE M. ZARIĆ za izradu doktorske disertacije i naučne zasnovanosti teme pod nazivom “EKSPERIMENTALNO ODREĐIVANJE VOLUMETRIJSKIH I STUKTURNIH SVOJSTAVA I MODELOVANJE SMEŠA NEZASIĆENIH ORGANSKIH JEDINJENJA”.

Na osnovu materijala priloženog uz Zahtev kandidata, Komisija podnosi sledeći

REFERAT

1. Podaci o kandidatu

1.1 Biografski podaci

Milana (Milan) Zarić, dipl. inž. tehnologije, rođena je 16.04.1985. godine u Vršcu, gde je i završila gimnaziju. Diplomirala je na Tehnološko-metalurškom fakultetu, Univerziteta u Beogradu, odsek Hemijsko inženjerstvo 2010. godine sa prosečnom ocenom 9,19. Diplomski rad “Optimizacija tehnika za inkapsulaciju jedinjenja sa antioksidativnim dejstvom u mikročestice” odbranila je septembra 2010. godine ocenom 10.

Doktorske studije je upisala školske 2010/11. godine na istom fakultetu, na smeru Hemijsko inženjerstvo. Položila je sve ispite predviđene planom i programom doktorskih studija, sa prosečnom ocenom 9,75. Od 2011. do 2015. bila je zaposlena u Inovacionom centru Tehnološko-metalurškog fakulteta, a od 2015. zaposlena je u NU Institut za hemiju, tehnologiju i metalurgiju, Univerziteta u Beogradu.

Trenutno je angažovana na projektu Ministarstva za prosvetu, nauku i tehnološki razvoj Republike Srbije, III 46010. U okviru svojih istraživanja bavila se inkapsulacijom jedinjenja sa antioksidativnim dejstvom u liposome, kompostiranjem duvanskog otpada i tretiranjem nikotina u duvanskom otpadu mikroorganizmima, kao i istraživanjem energetske integracije industrijskih postrojenja sa ciljem veće energetske efikasnosti. Trenutno se bavi proučavanjem volumetrijskih, strukturnih i transportnih svojstava smeša nezasićenih organskih jedinjenja.

Milana M. Zarić govori tečno engleski i nemački jezik.

1.2 Stečeno naučno-istraživačko iskustvo

U okviru doktorskih studija položila je 11/11 ispita predviđenih studijskim programom sa prosečnom ocenom 9,75 i odbranila je Završni ispit.

Spisak položenih ispita na doktorskim studijama:

Predmet	Broj ESPB	Ocena
1. Hemijska kinetika	5	9
2. Viši kurs termodinamike	5	10
3. Odabrana poglavlja matematičke analize	5	10
4. Odabrana poglavlja projektovanja procesa u biohemijskom inženjerstvu	5	10
5. Specijalna poglavlja prenosa mase	4	10
6. Biomasa kao izvor energije	4	9
7. Odabrana poglavlja projektovanja procesa u hemijskoj industriji	5	10
8. Fenomeni prenosa u biološkim sistemima	5	10
9. Odabrana poglavlja instrumentalne analize	7	9
10. Imobilisani katalizatori: tehnike imobilizacije, bioreaktori i primena	6	10
11. Engleski jezik	-	10
12. Završni ispit	30	10
Ukupno	81	9,75

Od 2011. do 2015. bila je zaposlena u Inovacionom centru Tehnološko-metalurškog fakulteta, a od januara 2015. zaposlena je u NU Institut za hemiju, tehnologiju i metalurgiju, Univerziteta u Beogradu, u zvanju istraživač pripravnik. Od aprila 2015. zaposlena je u zvanju istraživač saradnik. Angažovana je na projektu Ministarstva za prosvetu, nauku i tehnološki razvoj Republike Srbije, III 46010, Razvoj novih inkapsulacionih i enzimskih tehnologija za proizvodnju biokatalizatora i biološki aktivnih komponenata hrane u cilju poboljšanja njene konkurentnosti, kvaliteta i bezbednosti, čiji je rukovodilac prof. dr Branko Bugarski.

Milana M. Zarić je koautor tri rada objavljena u časopisima međunarodnog značaja (od čega je jedan rad kategorije M21, a dva rada kategorije M23) i 10 saopštenja na naučnim skupovima (od čega su tri saopštenja kategorije M33, a dva saopštenja kategorije M63).

Spisak objavljenih naučnih radova i saopštenja

Radovi objavljeni u časopisima međunarodnog značaja - M20

- Rad u vrhunskom međunarodnom časopisu, M21

1. M. M. Zarić, B. Bugarski, M. Lj. Kijevčanin, "Interactions of Molecules with *cis* and *trans* Double Bonds: A Theoretical Study of *cis*- and *trans*-2-Butene" ChemPhysChem, 17 (2016) 317-324, (IF (2013) = 2,241; ISSN: 0378-3812).

- Rad u međunarodnom časopisu, M23

1. Milana M. Zarić, Nenad M. Zarić, Jelena Ivković, Danijela Slavnić, Branko Bugarski, "Recent Deveopment of Bioaugmentation Methods for Tobacco Wastewater Treamtent", STUDIA UBB CHEMIA, LX, 4 (2015) 115-124. (IF(2014/2015) = 0,191; ISSN: 1224-7154)
2. Milana M. Zarić, Mirko Stijepovic, Patrick Linke, Jasna Stajić-Trošić, Branko Bugarski, Mirjana Kijevčanin, "Targeting heat recovery and reuse in industrial zone", Chem. Ind. Chem. Eng. Q. (2016) DOI: 10.2298/CICEQ150622009Z (IF(2014/2015) = 0,892; ISSN: 1451-9372)

Zbornici međunarodnih naučnih skupova – M30

- Saopštenje sa međunarodnog skupa štampano u celini, M33

1. Milana M. Zarić, Mirko Stijepović, Partick Linke, Mirjana Kijevčanin, Jasna Stajić-Trošić, Branko Bugarski, "Optimization of waste heat recovery via heat integration", IV Ineternational Congress "Engineering, Environment and Materials in Prosessing Industry", Jahorina, 04-06. mart 2015, 598-602.
2. Milana Zarić, Lucyna Łękawska, Branko M. Bugarski, Constantinos A. Georgiou, "Pectin methylesterase activity assay", III Ineternational Congress "Engineering, Environment and Materials in Prosessing Industry", Jahorina, 04-06. mart 2013, 645-648.
3. Nemanja Trifunović, Dejan Trifunović, Jasna Stajić-Trosić, Mirko Stijepović, Jovana Ilić, Milana Zarić, Aleksandar Grujić, "Sintered friction materials on iron base", 46th International October Conference on Mining and Metallurgy, Bor, 01-04. oktobar 2014, 581-584.

Zbornici skupova nacionalnog značaja – M60

- Saopštenje sa skupa nacionalnog značaja štampano u celosti, M63

1. Bojana D. Isailović, Ivana T. Kostić, Kata T. Trifković, Radoslava N. Stojanović, Milana M. Zarić, Verica B. Đorđević, Branko M. Bugarski, "Difuzija resveratrola

iz lipidnih mikročestica dobijenih različitim tehnikama”, Prva konferencija mladih hemičara Srbije sa međunarodnim učešćem, Beograd, 19-20. oktobar 2012, 117.

2. Ivana T. Kostić, Radoslava N. Stojanović, Vesna Lj. Ilić, Milana M. Zarić, Verica B. Manojlović, Branko M. Bugarski, “Development of a heme iron feed supplement for prevention and therapy of anemia in domestic”, Proceedings of 6th Central European Congress on Food, Novi Sad, Serbia, 23-26. maj 2012, 1639-1644.

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, III 46010, Milana M. Zarić, diplomirani inž. tehnologije, pokazala je izrazitu sklonost i sposobnost za bavljenje naučno-istraživačkim radom. Takođe, iz same predložene teme disertacije, kandidat je do sada objavio jedan rad u istaknutom međunarodnom časopisu M21, dok je jedan rad u pripremi, što ukazuje na njegov kvalitetan rad, pa tako ispunjava potrebne uslove za rad na predloženoj temi doktorske disertacije.

2. Predmet i cilj naučnog istraživanja

Predmet naučnog istraživanja u okviru predložene teme je eksperimentalno određivanje volumetrijskih i strukturnih svojstva smeša nezasićenih organskih jedinjenja i modelovanje njihovih interakcija.

Eksperimentalna istraživanja će obuhvatati merenja gustine i viskoznosti nezasićenih jedinjenja i njihovih smeša u širem temperaturnom intervalu na atmosferskom pritisku. Podaci o ovim svojstvima pomažu pri razumevanju strukture, bilo čistih supstanci ili smeša, na atmosferskom pritisku i određenom temperaturnom intervalu. Molekuli sa dvostrukim vezama igraju važnu ulogu u raznim sistemima i procesima. Neki od bitnih procesa su polimerizacija i prečišćavanje alkena.^[1,2] Polimeri, takođe mogu da sadrže dvostruke veze, koje značajno utiču na svojstva samih polimera, a pored njih molekuli sa dvostrukim vezama igraju značajnu ulogu u živim organizmima, kao što su masne kiseline, koje imaju uticaja na ljudsko zdravlje.^[3,4] Eksperimentalno određivanje svojstava smeša i modelovanje interakcija u smešama objašnjava i predviđa ponašanje jedinjenja u smešama. Sistemi izabrani za proučavanje su nezasićena organska jedinjenja, njihovi *cis*- i *trans*-izomeri, kao i smeše sa zasićenim organskim jedinjenjima.

Upravo zbog izuzetnog značaja poznavanja volumetrijskih svojstava pri različitim uslovima, u toku izrade ove doktorske teze posebna pažnja je posvećena aparaturi i proceduri merenja pomenute veličine.

Eksperimentalna merenja biće izvršena u Laboratoriji za određivanje hemijsko-inženjerskih parametara na Tehnološko-metalurškom fakultetu. Merenja će se vršiti na atmosferskom pritisku i u širem opsegu temperature. Vrednosti za gustinu određivaće se pomoću gustinomera Anton Paar DMA 5000, a vrednosti za indeks refrakcije pomoću

refraktometra Anton Paar RXA 156. Viskoznost čistih komponenti i njihovih smeša određivaće se na viskozimetru Anton Paar SVM 3000.

Za eksperimentalno istraživanje izabrana su nezasićena jedinjenja *cis*- i *trans*-3-heksen-1-ol, čija gustina će se meriti u širem opsegu temperatura i na atmosferskom pritisku. Pored toga, za navedene čiste supstance i smeše, biće merene i viskoznosti na atmosferskom pritisku i u širem temperaturnom opsegu, kao i indeks refrakcije. Na osnovu eksperimentalno određenih vrednosti viskoznosti, gustine i indeksa refrakcije moguće je izračunati promene viskoznosti pri mešanju $\Delta\eta$, dopunske molarne zapremine V^E i promene indeksa refrakcije Δn_D .^[5,6] Korelisanje ovako dobijenih podataka vrši se preko empirijske Redlich-Kister jednačine.^[7] Pored navedenih eksperimenata, vršiće se i snimanje IC spektara.

Na osnovu poznavanja eksperimentalno određenih svojstva moguće je razumeti ponašanje smeša, kao i predvideti njihovo ponašanje. S obzirom da istraživanje obuhvata smeše nezasićenih *cis*- i *trans*-izomera, kao i odgovarajuća zasićena organska jedinjenja, rezultati će objasniti uticaj dvostrukih veza, kao i *cis*- i *trans*-izomera na ponašanje smeša. Eksperimentalna ispitivanja će obuhvatiti i snimanje IC spektara, na osnovu kojih je moguće izvesti zaključke o međumolekulskim interakcijama.

Osim eksperimentalnih istraživanja, biće urađeno i modelovanje interakcija jedinjenja u sistemima. Pomoću IC spektroskopije mogu se postaviti pretpostavke koje funkcionalne grupe su uključene u međumolekulske interakcije, što će omogućiti dizajniranje sistema za teorijsko modelovanje međumolekulskih interakcija. Modelovanje interakcija u smešama će se raditi pomoću kvantno-mehaničkih metoda. Rezultati modelovanja interakcija će omogućiti razumevanje ponašanja i omogućiti predviđanja ponašanja smeša. Dosadašnja ispitivanja nekovalentnih interakcija su se uglavnom bazirala na proučavanju aromatičnih molekula,^[8,9] i proučavanju dimera etena, kao najjednostavnijeg model-sistema sa dvostrukom vezom.^[10-13] U ovoj tezi će biti ispitivane različite konfiguracije dvostruke veze korišćenjem kvantno-mehaničkih metoda.^[14-19] Kao najjednostavniji model-sistem sa dvostrukom vezom koji poseduje *cis*- i *trans*-izomere, izabrani su *cis*- i *trans*-2-buten za analizu nekovalentnih interakcija. Izračunate energije interakcija će pokazati razlike u jačini interakcija u dimerima *cis*-2-butena, *trans*-2-butena i butana, kao i jačini interakcija između *cis*- i *trans*-2-butena, zatim *cis*-2-butena i zasićenog butana, *trans*-2-butena i zasićenog butana. Slično modelovanje međumolekulskih interakcija će biti urađeno za jedinjenja koja se eksperimentalno proučavaju u ovoj tezi.

Cilj istraživanja u okviru doktorske disertacije je dobijanje modela koji predviđaju ponašanje smeša nezasićenih organskih jedinjenja. Očekuju se rezultati koji opisuju ponašanje nezasićenih jedinjenja i objašnjavaju razliku u svojstvima nezasićenih i zasićenih jedinjenja, kao i razlike u ponašanju *cis*- i *trans*-izomera.

Na osnovu dobijenih rezultata biće moguće okarakterisati svojstva proučavanih smeša. Nezasićena jedinjenja se nalaze u velikom broju molekulskih sistema kao što su petrohemijski proizvodi, polimeri, micelarni sistemi, biološki sistemi, uključujući masne kiseline. Poznavanje karakteristika smeša nezasićenih organskih jedinjenja omogućava razumevanje i predviđanje osobina i ponašanja smeša koje ih sadrže.

Literatura

- [1] W. Gao, D. Cui, *J. Am. Chem. Soc.* 130 (2008) 4984-4991.
- [2] Y. Fan, M. B. Hall, *J. Am. Chem. Soc.* 124 (2002) 12076-12077.
- [3] R. R. Mensink, P. L. Zock, M. B. Katan, G. Hornstra, *J. Lipid Res.* 33 (1992) 1493-1501.
- [4] D. Kromhout, A. Menotti, B. Bloemberg, C. Aravanis, H. Blackburn, R. Buzina, A. Dontas, F. Fidanza, S. Giampaoli, A. Jansen, *Prev. Med.* 24 (1995) 308-315.
- [5] B. Đorđević, V. Valent, S. Šerbanović, *Termodinamika sa termotehnikom*, TMF, Beograd, 2003.
- [6] Y. P. Handa, G. C. Benson, *Fluid Phase Equilib.* 3 (1979) 185-249.
- [7] O. Redlich, A.T. Kister, *Ind. Eng. Chem.* 40 (1948) 345-348.
- [8] Y. Cho, W. J. Cho, I. S. Youn, G. Lee, N. J. Singh, K. S. Kim, *Acc. Chem. Res.* 47 (2014) 3321-3330.
- [9] L. M. Salonen, M. Ellermann, F. Diederich, *Angew. Chem., Int. Ed.* 50 (2011) 4808-4842.
- [10] Y. N. Kalugina, V. N. Cherepanov, M. A. Buldakov, N. Zvereva-Loëte, V. Boudon, *J. Comput. Chem.* 33 (2011) 319-330.
- [11] R. A. King, *Mol. Phys.* 107 (2009) 789-795.
- [12] A. Gloß, M. P. Brändle, W. Kloppe, H. P. Lüthi, *Mol. Phys.* 110 (2012) 2523-2534.
- [13] K. S. Kim, S. Karthikeyan, N. J. Singh, *J. Chem. Theory Comput.* 7 (2011) 3471-3477.
- [14] M. J. Frisch et al., *Gaussian 09, Revision D.01*, Gaussian, Inc., Wallingford CT, (2013).
- [15] J. Pittner, P. Hobza, *Chem. Phys. Lett.* 390 (2004) 496-499.
- [16] D. E. Woon, T. H. Dunning Jr., *J. Chem. Phys.* 98 (1993) 1358-1371.
- [17] R. A. Kendall, T. H. Dunning Jr., R. J. Harrison, *J. Chem. Phys.* 96 (1992) 6796-6806.
- [18] Y. Zhao, D. G. Truhlar, *J. Phys. Chem. A* 110 (2006) 5121-5129.
- [19] I. D. Mackie, G. A. DiLabio, *J. Chem. Phys.* 135 (2011) 134318.

3. Polazne hipoteze

Poznavanje gustina, viskoznosti i volumetrijskih svojstva supstanci i višekomponentnih smeša je od izuzetnog značaja za projektovanje i analizu različitih industrijskih procesa. Imajući ovo u vidu, u toku izrade doktorske disertacije biće urađena analiza svojstva nezasićenih i zasićenih jedinjenja, razlike u ponašanju nezasićenih i zasićenih organskih jedinjenja, kao i razlike u ponašanju *cis*- i *trans*- izomera nezasićenih jedinjenja.

Zbog svega navedenog u predloženoj doktorskoj disertaciji će biti prikazani rezultati eksperimentalnih merenja čistih nezasićenih i zasićenih jedinjenja, kao i njihovih smeša na atmosferskom pritisku. Pored toga, biće prikazani i rezultati međumolekulskog modelovanja interakcija u čistim jedinjenjima, kao i u smešama.

Može se pretpostaviti da će se na osnovu dobijenih rezultata steći bolji uvid u teoriju ponašanja ovih sistema, odnosno, biće moguće objasniti pojave koje se u njima javljaju kao posledica molekulske strukture i međumolekulskih interakcija. Iz dobijenih rezultata će se izvesti zaključci o svojstvima smeša nezasićenih i zasićenih jedinjenja, zaključci o razlikama u njihovom ponašanju, predviđanje ponašanja smeša nezasićenih i zasićenih organskih jedinjenja, kao i razlike u ponašanju *cis*- i *trans*- izomera nezasićenih jedinjenja i njihovih smeša.

4. Naučne metode istraživanja

Metode istraživanja koje će se koristiti tokom doktorske disertacije su eksperimentalna istraživanja, određivanje volumetrijskih svojstva, viskoznosti i indeksa refrakcije zasićenih i nezasićenih *cis*- i *trans*- izomera organskih jedinjenja i njihovih smeša. Na osnovu eksperimentalnih merenja, biće izračunata dopunska zapremina i promena viskoznosti smeša:

Merenja gustina na atmosferskom pritisku će biti izvršena na gustomeru tipa Anton Paar DMA 5000 (preciznosti $10^{-6} \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$). Sastavi smeša će se određivati posebnom procedurom uz merenje mase, vagom tipa Mettler AG 204, preciznosti 10^{-4} g . Viskoznosti na atmosferskom pritisku će se meriti Stabinger SVM 3000/G2 viskozimetrom istog proizvođača, preciznosti 0.1% od merene vrednosti, dok će se za merenje indeksa refrakcije na istom pritisku koristiti Anton Paar RXA-156 refraktometar, preciznosti 2×10^{-5} .

Za određivanje međumolekulskih interakcija ispitivanih jedinjenja koristiće se IC spektroskopija. Nakon analize IC spektara, biće moguće pretpostaviti geometrije sistema koji će se koristiti za modelovanje interakcija u čistim jedinjenjima i smešama. Za modelovanje interakcija u čistim jedinjenjima i smešama koristiće se veći broj kvantno-mehaničkih metoda. Korišćenjem *ab initio* metode, CCSD(T), HF i MP2, i DFT metode, BLYP-D3, BP86-D3, M05-D3, M052X-D3, M06-D3, M06HF-D3, TPSS-D3, PBE1PBE-D3, B3LYP-D3 i B2PLYP-D3, sa nekoliko baznih skupova, cc-pVDZ, cc-pVTZ, aug-cc-pVDZ i 6-31++G**. U cilju pronalaženja metode koja daje najpouzdanije rezultate, rezultati velikog broj metoda će biti upoređeni sa CCSD(T)/CBS metodom, koja je smatra zlatnim standardom u kvantnoj mehanici. Optimalne geometrije interakcija će biti određene kao minimumi na potencijalnim krivima, koje će biti izračunate nizom proračuna na pojedinačnim tačkama. Proračuni će biti urađeni u programskom paketu Gaussian 09.

5. Očekivani naučni doprinos

Očekuje se da će istraživanja planirana u okviru ove doktorske disertacije dati višestruko značajan naučni doprinos, pri čemu se može izdvojiti sledeće:

- povećanje fundamentalnog poznavanja volumetrijskih svojstava razmatranih čistih komponenti zasićenih i nezasićenih organskih jedinjenja, kao i *cis*- i *trans*-izomera nezasićenih jedinjenja i njihovih smeša na atmosferskom pritisku,

- proširenje baza podataka novim podacima o smešama koje sadrže nezasićena jedinjenja,
- utvrđivanje uticaja temperature na izvedena svojstva zasićenih i nezasićenih organskih jedinjenja, kao i *cis*- i *trans*-izomera i njihovih smeša,
- predviđanje ponašanja smeša zasićenih i nezasićenih organskih jedinjenja, kao i *cis*- i *trans*- izomera nezasićenih jedinjenja,
- uspostavljanje procedure za kvantno-mehaničke proračune nekovalentnih interakcija jedinjenja sa dvostrukim vezama nalaženjem metoda koje daju najpouzdanije rezultate,
- modelovanje geometrija i određivanje energija nekovalentnih interakcija korišćenjem kvantno-mehaničkih metoda.

6. Plan istraživanja i struktura rada

U toku istraživanja biće urađeno sledeće:

- pregled literature u cilju pronalaženja različitih metoda za eksperimentalna merenja, kao i metoda za međumolekulsko modelovanje interakcija
- odabir odgovarajućih zasićenih i nezasićenih organskih jedinjenja, kao i *cis*- i *trans*- izomera za eksperimentalna merenja njihovih osnovnih termodinamičkih svojstava, kao i svojstava njihovih smeša na atmosferskom pritisku,
- eksperimentalno određivanje gustina zasićenih i nezasićenih organskih jedinjenja i *cis*- i *trans*- izomera i njihovih smeša na atmosferskom pritisku u određenom opsegu temperatura i obrada dobijenih podataka,
- proračun izvedenih volumetrijskih svojstava za pomenute sisteme, kao i analiza dobijenih rezultata i procena ponašanja zasićenih i nezasićenih organskih jedinjenja, kao i *cis*- i *trans*- izomera i njihovih smeša,
- modelovanje međumolekulskih interakcija pomoću kvantno-mehaničkih metoda.

Očekuje se da će doktorska disertacija imati sledeća poglavlja: *Uvod, Teorijski deo, Eksperimentalni deo, Rezultati eksperimentalnih merenja, Modelovanje dobijenih rezultata, Zaključak, Literatura.*

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

U okviru *Teorijskog dela* doktorske disertacije biće obuhvaćen pregled procedura za određivanje volumetrijskih svojstava na atmosferskom pritisku, za čiste supstance i za njihove smeše i njihovo modelovanje kvantno-mehaničkim metodama.

U okviru *Eksperimentalnog dela*, biće dat prikaz izbora sistema koji su korišćeni u daljoj analizi, opis aparature na kojoj su rađena eksperimentalna merenja na atmosferskom pritisku, kao i opis obrade eksperimentalnih podataka za čista jedinjenja, kao i za njihove smeše.

U poglavlju *Rezultati eksperimentalnih merenja*, biće dati kompletni rezultati sa ispitivanjem uticaja temperature i sastava na ponašanje zasićenih i nezasićenih *cis*- i *trans*-izomera organskih jedinjenja, kako i njihovih smeša.

Poglavljje *Modelovanje dobijenih rezultata* obuhvatiće proračun i analizu međumolekulskih interakcija izabranih jedinjenja i njihovih smeša.

U poglavlju *Zaključak* biće sumirani svi dobijeni rezultati na osnovu izvedenih istraživanja.

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 **MILANA M. ZARIĆ** 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 VOLUMETRIJSKIH I STUKTURNIH SVOJSTAVA I MODELOVANJE SMEŠA NEZASIĆENIH ORGANSKIH JEDINJENJA”** naučno utemeljena. Istraživanja u okviru ove doktorske disertacije pripadaju naučnoj oblasti Tehnološko inženjerstvo, uža naučna oblast hemijsko inženjerstvo, za koju je matičan Tehnološko-metalurški fakultet Univerziteta u Beogradu. Komisija predlaže Nastavno-naučnom veću Tehnološko-metalurškog fakulteta Univerziteta u Beogradu da kandidatu Milani M. Zarić odobri izradu doktorske disertacije pod navedenim naslovom. Za mentora se predlaže dr Mirjana Kijevčanin, redovni profesor Tehnološko-metalurškog fakulteta u Beogradu.

U Beogradu, 04.04.2016. godine

ČLANOVI KOMISIJE

1. Dr Mirjana Kijevčanin, redovni profesor
Univerziteta u Beogradu, Tehnološko-metalurški fakultet

2. Dr Branko Bugarski, redovni profesor
Univerziteta u Beogradu, Tehnološko-metalurški fakultet

3. Dr Ivona Radović, vanredni profesor
Univerziteta u Beogradu, Tehnološko-metalurški fakultet

4. Dr Vesna Medaković, docent
Univerziteta u Beogradu, Hemijski fakultet