

ТЕХНОЛОШКО-МЕТАЛУРШКИ
ФАКУЛТЕТ

35/206
(Број захтева)
01.06.2018.
(датум)

Образац 2
УНИВЕРЗИТЕТ У БЕОГРАДУ
ВЕЋЕ НАУЧНИХ ОБЛАСТИ ТЕХНИЧКИХ
НАУКА

(назив већа научне области коме се захтев упућује)

Београд, Студентски трг бр. 1

ЗАХТЕВ

за давање сагласности на реферат о урађеној докторској дисертацији

Молимо да, сходно члану 47. ст. 5. тачка 4. Статута Универзитета у Београду (“Гласник Универзитета у Београду” број 162/11, пречишћен текст, 167/12, 172/13 и 178/14), дате сагласност на реферат о урађеној докторској дисертацији кандидата:

МИЛАНЕ (Милан) ЗАРИЋ, дипломираног инжењера технологије

КАНДИДАТ: **МИЛАНА (Милан) ЗАРИЋ** пријавила је докторску дисертацију под називом:
„Експериментално одређивање волуметријских и структурних својстава и моделовања смеша незасићених органских једињења“

Из научне области: **ТЕХНОЛОШКО ИНЖЕЊЕРСТВО**

Универзитет је дана **16.05.2016.** године, својим актом **61206-2285/2-16**, дао сагласност на предлог теме докторске дисертације која је гласила:

„Експериментално одређивање волуметријских и структурних својстава и моделовања смеша незасићених органских једињења“

Комисија за оцену и одбрану докторске дисертације кандидата: **МИЛАНЕ (Милан) ЗАРИЋ** образована је на седници Наставно-научног већа одржаној **26.04.2018.** године Одлуком Факултета под бр. **35/155**, у саставу:

Име и презиме	Звање	Научна област
1. Др Мирјана Кијевчанин	Редовни професор	Хемијско инжењерство
2. Др Бранко Бугарски	Редовни професор	Хемијско инжењерство
3. Др Ивона Радовић	Ванредни професор	Хемијско инжењерство
4. Др Весна Медаковић	Доцент	Хемија

Студен је уписан на докторске студије шк. 2010/2011. године. На захтев студента, а уз сагласност ментора, декан је донео Решење бр. 20/143 од 06.10.2016. године о продужењу рока за завршетак студија за два семестра шк. 2016/2017 године.

На захтев студента и на предлог ментора, Наставно-научно веће донело је Одлуку бр. 35/371 од 26.10.2017. године о продужењу рока за завршетак студија и за још годину дана шк. 2017/2018. године.

Наставно-научно веће Факултета прихватило је реферат Комисије за оцену и одбрану докторске дисертације на седници одржаној дана **31.05.2018.** године.

ДЕКАН ФАКУЛТЕТА

Проф. др Ђорђе Јанаћковић

На основу чл. 40. став 3. Закона о високом образовању, чл. 104. став 3. Статута Универзитета у Београду, чл. 40. Статута ТМФ-а и чл. 39. Правилника о докторским студијама ТМФ, на седници Наставно-научног већа Технолошко-металуршког факултета од 31.05.2018. године, донета је

О Д Л У К А

о прихватању Реферата о оцени докторске дисертације

Прихвата се Реферат Комисије у саставу: др Мирјана Кијевчанин, редовни професор Универзитета у Београду, Технолошко-металуршки факултет, др Бранко Бугарски, редовни професор Универзитета у Београду, Технолошко-металуршки факултет, др Ивона Радовић, ванредни професор Универзитета у Београду, Технолошко-металуршки факултет, др Весна Медаковић, доцент Универзитета у Београду, Хемијски факултет, о прегледу и оцени урађене докторске дисертације под називом: **„Експериментално одређивање волуметријских и структурних својстава и моделовање смеша незасићених органских једињења“** коју је поднела **Милана Зарић**, дипломирани инжењер технологије и упућује се на сагласност Већу научних области техничких Универзитета у Београду.

Веће научних области техничких наука Универзитета у Београду дало је сагласност на предлог теме докторске дисертације Милане Зарић, под називом **„Експериментално одређивање волуметријских и структурних својстава и моделовање смеша незасићених органских једињења“** Одлуком број: 61206-2285/2-16 од 16.05.2016. године.

Верификација научних доприноса:

Kategorija 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** (2), 2016, pp. 317-324 (IF (2016)=3.075; ISSN: 1439-4235), DOI: 10.1002/cphc.201500592

Kategorija M23:

1. M. M. Zarić, B. Bugarski, M. Lj. Kijevčanin, Best methods for calculating interaction energies in 2-butene and butane systems, *Comput. Theor. Chem.*, **1117**, 2017, pp. 150-161. (IF (2016)=1.549; ISSN: 2210-271X), DOI: 10.1016/j.comptc.2017.08.001
2. M. M. Zarić, M. Stijepović, P. Linke, J. Stajic-Trošić, B. Bugarski, M. Lj. Kijevčanin, Targeting heat recovery and reuse in industrial zone, *Chem. Ind. Chem. Eng. Q.*, **23** (1), 2017, pp 73-82 (IF (2016)=0.664; ISSN: 1451-9372), DOI: 10.2298/CICEQ150622009Z

Докторска дисертација и реферат о оцени докторске дисертације достављају се на увид јавности, а по истеку рока од 30 дана, на сагласност Већу научних области техничких наука Универзитета у Београду.

Одлуку доставити: Већу научних области техничких наука Универзитета у Београду, ментору, Служби за наставно-студентске послове, Библиотеци и Архиви факултета.

Д Е К А Н

Проф. др Ђорђе Јанаћковић

NASTAVNO-NAUČNOM VEĆU
UNIVERZITET U BEOGRADU
TEHNOLOŠKO-METALURŠKI FAKULTET

Predmet: Referat o urađenoj doktorskoj disertaciji kandidata **Milane M. Zarić**, dipl. inž. tehnologije

Odlukom br. 35/155 od 26.04.2018. godine, imenovani smo za članove Komisije za pregled, ocenu i odbranu doktorske disertacije kandidata **Milane M. Zarić**, dipl. inž. tehnologije, pod naslovom: **“Eksperimentalno određivanje volumetrijskih i strukturnih svojstava i modelovanje smeša nezasićenih organskih jedinjenja”**.

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

R E F E R A T

1. UVOD

1.1. Hronologija odobravanja i izrade disertacije

U oktobru 2010. kandidat **Milana M. Zarić**, dipl. inž. tehnologije, je upisala doktorske studije na Tehnološko-metalurškom fakultetu na smeru Hemijsko inženjerstvo.

19. 02. 2016. Kandidat **Milana M. Zarić**, dipl. inž. tehnologije, prijavila je temu doktorske disertacije pod nazivom **“Eksperimentalno određivanje volumetrijskih i strukturnih svojstava i modelovanje smeša nezasićenih organskih jedinjenja”**

03. 03. 2016. Nastavno-naučno veće Tehnološko-metalurškog fakulteta Univerziteta u Beogradu je usvojilo sastav Komisije za ocenu naučne zasnovanosti predložene teme odlukom br. 35/99.

14. 04. 2016. na sednici Nastavno-naučnog veća Tehnološko-metalurškog fakulteta, na osnovu izveštaja Komisije, doneta je Odluka br. 35/156 o prihvatanju predloga teme doktorske disertacije **Milane M. Zarić**, dipl. inž. tehnologije, pod nazivom **“Eksperimentalno određivanje volumetrijskih i strukturnih svojstava i modelovanje smeša nezasićenih organskih jedinjenja”**. Za mentora ove doktorske disertacije imenovana je dr Mirjana Kijevčanin, redovni profesor TMF-a.

16. 05. 2016. doneta je Odluka Univerziteta, 02 broj: 61206-2285/2-16, o saglasnosti na predlog teme doktorske disertacije **Milane M. Zarić**, dipl. inž. tehnologije, pod nazivom **“Eksperimentalno određivanje volumetrijskih i strukturnih svojstava i modelovanje smeša nezasićenih organskih jedinjenja”**.

26. 04. 2018. na sednici Nastavno-naučnog veća Tehnološko-metalurškog fakulteta, doneta je Odluka br. 35/155 o imenovanju članova komisije za pregled, ocenu i odbranu doktorske disertacije **Milane M. Zarić**, dipl. inž. tehnologije, pod nazivom **“Eksperimentalno određivanje volumetrijskih i strukturnih svojstava i modelovanje smeša nezasićenih organskih jedinjenja”**.

1.2. Naučna oblast disertacije

Istraživanja u okviru ove doktorske disertacije pripadaju naučnoj oblasti Tehnološko inženjerstvo (uža naučna oblast Hemijsko inženjerstvo), za koju je Tehnološko-metalurški fakultet Univerziteta u Beogradu matična ustanova.

Mentor ove doktorske disertacije je dr Mirjana Kijevčanin, redovni profesor Tehnološko-metalurškog fakulteta, Univerziteta u Beogradu, koja je objavila preko 100 radova u međunarodnim naučnim časopisima.

1.3. Biografski podaci o kandidatu

Milana (Milan) Zarić, dipl. inž. tehnologije, rođena je 16. aprila 1985. godine u Vršcu, gde je završila gimnaziju. Diplomirala je na Tehnološko-metalurškom fakultetu Univerziteta u Beogradu, odsek Hemijsko inženjerstvo, 2010. godine sa prosečnom ocenom 9,19. Diplomski rad odbranila je septembra 2010. godine. Školske 2010/2011. upisala je doktorske studije na matičnom fakultetu, na studijskom programu Hemijsko inženjerstvo. Položila je sve predviđene ispite na doktorskim studijama, kao i završni ispit, 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, Centar za elektrohemiju. U zvanju istraživača saradnika je od 2015. godine.

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 povećanja njene konkurentnosti, kvaliteta i bezbednosti", kojim rukovodi prof. dr Zorica Knežević-Jugović. Trenutno se bavi proučavanjem volumetrijskih i strukturnih svojstva smeša nezasićenih organskih jedinjenja i njihovim modelovanjem kvantno mehaničkim metodama.

Kao student doktorskih studija u okviru „FP7 Regpot Nanotech FTM“ projekta radila je na Poljoprivrednom fakultetu u Atini više nedelja tokom 2011. i 2012. godine, dok je tokom 2017. i 2018. u okviru bilateralnog DAAD projekta boravila na RWTH Univerzitetu u Ahenu.

Milana M. Zarić je koautor većeg broja naučnih radova objavljenih u časopisima međunarodnog značaja i prezentovanih na konferencijama.

Tečno govori engleski i nemački jezik. Član je Srpskog hemijskog društva.

2. OPIS DISERTACIJE

2.1. Sadržaj disertacije

Doktorska disertacija kandidata, **Milane M. Zarić**, dipl. inž. tehnologije, napisana je na 208 strane, uključuje 30 tabela, 68 slika, kao i 226 literaturnih navoda. Doktorska disertacija sadrži sedam poglavlja: Uvod, Teorijski deo, Eksperimentalni deo i metodologija, Eksperimentalni rezultati i diskusija rezultata, Modelovanja zasićenih i nezasićenih sistema i njihovih interakcija, Zaključak i Literatura.

2.2. Kratak prikaz pojedinačnih poglavlja

U okviru doktorske disertacije kandidat **Milana M. Zarić** je radila na eksperimentalnom merenju i određivanju volumetrijskih i strukturnih svojstva smeša nezasićenih organskih jedinjenja, kao i uvođenju kvantno mehaničkih metoda u cilju opisivanja interakcija ispitivanih organskih molekula.

U prvom poglavlju disertacije (**1. Uvod**) istaknut je značaj pristupa koji je primenjen u ovom radu na ispitivanje nezasićenih organskih jedinjenja. Istaknut je značaj termodinamičkih i strukturnih svojstava koja su merena i analizirana u okviru rada na ovoj disertaciji. Objašnjen je razlog motivacije izbora zasićenih i nezasićenih organskih jedinjenja, kao sistema za ispitivanje, kao i razlike u njihovim karakteristikama i razlike među nezasićenim *cis*- i *trans*- izomera. Predstavljena je metodologija istraživanja koja je primenjena u doktorskoj tezi, i daj je kratak prikaz sadržaja teze.

U drugom poglavlju disertacije (**2. Teorijski deo**) objašnjene su karakteristike ispitivanih sistema. Predstavljena su termodinamička i strukturna svojstva, koja su analizirana u ovoj tezi (gustina,

viskoznost, indeks refrakcije i brzina prostiranja zvuka). Zatim, detaljno je opisana procedura obrade svih eksperimentalnih podataka i date su korišćene jednačine za izračunavanje izvedenih dopunskih termodinamičkih svojstava za svaku izmerenu veličinu. Takođe, date su teorijske osnove kvantne mehanike i prikazan je model koji je korišćen pri primeni kvantno mehaničkih metoda za ispitivane sisteme.

U trećem poglavlju disertacije (**3. Eksperimentalni deo i metodologija**) dat je pregled eksperimentalnih aparatura korišćenih u ovom radu za merenje termodinamičkih i strukturnih svojstava. Data je procedura pripreme uzorka i opisan je proces eksperimentalnih merenja ispitivanih smeša koja su urađena u ovoj disertaciji. Prikazan je način izvođenja jednačine za nesigurnost merenja. Pored toga, dat je pregled i spisak nivoa teorija, svih metoda i baznih skupova koji su korišćeni u toku kvantno mehaničkih proračuna. Prikazan je način na koji su proračuni urađeni na odgovarajućim model sistemima.

Četvrto poglavlje disertacije (**4. Eksperimentalni rezultati i diskusija rezultata**) sastoji se iz dva dela, u prvom delu su predstavljeni rezultati dobijeni eksperimentalnim merenjem veličina (gustine, viskoznosti, indeksi refrakcija i brzina prostiranja zvuka) na sedam temperatura, na atmosferskom pritisku, dok su u drugom delu predstavljeni rezultati FT-IR analize. Oba dela mogu da se podele na tri segmenata: u prvom segmentu, predstavljeni su rezultati čistih komponenti, u drugom segmentu su predstavljeni rezultati izmerenih smeša, a u trećem segmentu su analizirane rezultati.

U prvom segmentu prvog dela, predstavljeni su rezultati merenja svojstava čistih supstanci i njihove vrednosti su upoređene sa literaturnih vrednostima, koje su nađene detaljnom pretragom literature. Zatim su predstavljeni rezultati eksperimentalnih merenja binarnih smeša. Za smešu koja je od ranije poznata, urađeno je poređenje dobijenih eksperimentalnih podataka sa literaturnim podacima. Za ispitivane sisteme sa nezasićenim i zasićenim alkoholom, izračunate su izvedene veličine za svaku izmerenu veličinu. Pored toga, izvršeno je poređenje podataka dvokomponentnih smeša i ispitivan je uticaj dvostrukih veza na strukturna svojstva. U trećem segmentu prvog dela data je analiza dobijenih rezultata i poređenje sistema sa nezasićenim alkoholom i zasićenim alkoholom. Na osnovu ovog poređenja termodinamičkih i strukturnih svojstava objašnjen je uticaj dvostruke veze u nezasićenim alkoholima na osobine smeša. Rezultati su prikazani grafički u tekstu, a brojčane vrednosti su date u tabelama, u Prilogu A – tabele.

U drugom delu ovog poglavlja dati su rezultati FT-IR analize. Prvo su prikazani FT-IR spektri čistih komponenta, zatim su prikazani FT-IR spektri binarnih sistema i zatim je prikazano njihovo poređenje. Uz analizu spektara i njihovih razlika, a data je i analiza međumolekulskih interakcija. Pored toga, ponašanja i razlike u spektrima, kao i uticaj dvostruke veze i uticaj -OH alkoholne grupe na strukturna svojstva ispitivanih smeša modelovano je kvantno mehaničkim metodama na odgovarajućim model sistemima.

U petom poglavlju disertacije (**5. Modelovanja zasićenih i nezasićenih sistema i njihovih interakcija**) predstavljeno je modelovanje ispitivanih sistema, zasićenih i nezasićenih organskih jedinjenja i ispitivanje uticaja dvostruke veze na međumolekulske interakcije. Ovo poglavlje je podeljeno na dva dela, u prvom delu opisano je modelovanje energije interakcija na sistemima sa dvostrukom vezom, a u drugom delu dato je poređenje tačnosti nivoa teorije (metoda i baznih skupova) za ispitivane sisteme. U ovom poglavlju prikazani su rezultati ispitivanja energija interakcija u model sistemima nezasićeni+nezasićeni sistemi, nezasićeni+zasićeni sistemi i zasićeni+zasićeni sistemi. Poređenje rezultata za različite sisteme je omogućilo izvođenje zaključaka o uticaju dvostrukih veza na energije i geometrije interakcija.

U šestom poglavlju doktorske disertacije (**6. Zaključak**) dat je pregled rezultata i zaključaka izvedenih na osnovu rezultata predstavljenih u prethodnim poglavljima. Opisana je kratka analiza rezultata za binarne smeše, zasićene i nezasićene, kao i analiza dobijenih dopunskih veličina. Zatim je dat pregled FT-IR analize i uticaja dvostruke veze na međumolekulske interakcije. I na kraju, predstavljeni su rezultati dobijeni kvantno mehaničkim modelovanjem i poređenje

međumolekulskih interakcija nezasićenih i zasićenih molekula. Izvedeni su opšti zaključci o uticaju dvostruke veze na međumolekulske interakcije.

U sedmom poglavlju disertacije (**7. Literatura**) dat je pregled literature korišćene pri izradi disertacije.

3. OCENA DISERTACIJE

3.1. Savremenost i originalnost

Imajući u vidu da se poslednjih nekoliko godina značajno povećala svest o značaju zasićenih i nezasićenih masnih kiselina, probudila se i potreba za sagledavanjem karakteristika i ponašanja ovih zasićenih i nezasićenih supstanci. S druge strane, s obzirom na upotrebu različitih zasićenih i nezasićenih organskih jedinjenja u industrijskim procesima, od izuzetnog značaja je poznavanje ponašanja tj. poznavanje termodinamičkih i strukturnih svojstava ovih supstanci pri različitim uslovima.

Neka od najvažnijih svojstava fluida, kako sa teorijske, tako i sa praktične tačke gledišta, jesu gustina i viskoznost. Pouzdani podaci o gustini i viskoznosti pomažu pri razumevanju molekularne strukture, bilo čistih supstanci bilo smeša. Za detaljniju analizu termodinamičkih i strukturnih svojstava, u ovoj disertaciji urađeno je i merenje indeksa refrakcije i brzine prostiranja zvuka.

U ovoj doktorskoj disertaciji su eksperimentalno i modelovanjem obrađene dve binarne smeše, jedna sa zasićenim alkoholom: 1-heksanol + n-heksan i druga sa nezasićenim alkoholom, *cis*-3-heksen-1-ol + n-heksan. Sve ispitivane supstance su poznate i korišćene u industrijskim procesima, ali termodinamički parametri za *cis*-3-heksen-1-ol, kao i njihove smeše se ne mogu naći u literaturi.

U ovoj disertaciji, predstavljeni eksperimentalni podaci su prvi put određeni, što je doprinelo značajnom sagledavanju njihovog industrijskog ponašanja. Za navedene smeše, kao i čiste supstance merene su gustina, viskoznosti, kao i indeks refrakcije i brzina zvuka u opsegu temperatura 288,15-318,15 K i na atmosferskom pritisku. Sve dobijene dopunske veličine iz izmerenih eksperimentalnih podataka su korelisane Redlich-Kisterovim polinomom.

U ovoj doktorskoj disertaciji su ispitane razlike između zasićenih i nezasićenih organskih jedinjenja, njihova termodinamička i strukturna svojstva, kao i razlike u međumolekulskim interakcijama, da bi se utvrdilo koliki i kakav je uticaj dvostrukih veza. Pored eksperimentalnih merenja, korišćeno je veoma aktuelno, savremeno teorijsko modelovanje međumolekulskih interakcija kvantno mehaničkim metodama. Na osnovu dobijenih rezultata su izvedeni zaključci o ponašanju smeša zasićenih i nezasićenih supstanci. U ovoj doktorskoj disertaciji, prikazana je metodologija kombinovanja eksperimentalnog proučavanja i teorijskog modelovanja interakcija, što čini ovu doktorsku disertaciju veoma aktuelnom. Metodologija primenjena u ovoj disertaciji je značajan naučni pomak, pa će ova metodologija biti korišćena i za proučavanje sistema drugih smeša. Rezultati dobijeni u ovoj disertaciji predstavljaju originalan naučni doprinos.

3.2. Osvrt na referentnu i korišćenu literaturu

Tokom izrade doktorske disertacije Kandidat je izvršio pregled naučne i stručne literature iz relevantnih naučnih oblasti vezanih za problematiku koja se u disertaciji obrađuje. Većina pregledane literature su bili radovi objavljeni u vodećim svetskim časopisima u oblasti termodinamike, hemije, fizičke hemije i hemijskog inženjerstva.

Takođe, nakon pregleda literature je utvrđeno da nema termodinamičkih podataka za supstancu *cis*-3-heksen-1-ol kao i njegove smeše sa heksanom, tako da je ovaj sistem izabran kao predmet istraživanja u ovoj doktorskoj disertaciji.

U ovoj doktorskoj disertaciji ukupno je navedeno 224 referenci, koje obuhvataju uglavnom radove iz oblasti termodinamike, hemije i hemijskog inženjerstva, kao i kvantno mehaničkih proračuna.

3.3. Opis i adekvatnost primenjenih naučnih metoda

Naučne metode koje su primenjene tokom rada na ovoj doktorskoj disertaciji su eksperimentalna merenja termodinamičkih i strukturnih svojstava odabranih uzoraka na različitim temperaturama i modelovanje energija međumolekulskih interakcija na model sistemima ispitivanih molekula. Gustine, viskoznosti, indeksi refrakcije i brzine prostiranja zvuka čistih uzoraka zasićenog 1-heksanola i nezasićenog, cis-3-heksen-1-ol alkohola i alkana kao rastvarača, n-heksana, kao i njihovih smeša, su merene na različitim temperaturama (u temperaturnom opsegu od 288,15 do 318,15 K) i atmosferskom pritisku. Pomoću dobijenih eksperimentalnih rezultata, korišćenjem adekvatnih jednačina dobijene su dopunske veličine za sva izmerena svojstva, koje su korelisane Redlich-Kisterovom jednačinom za binarne smeše. Na uređaju najnovije generacije, Anton Paar DSA 5000 M, sa preciznošću od 10^{-6} g·cm⁻³ i tačnošću od $5 \cdot 10^{-6}$ g·cm⁻³, merena je gustina na atmosferskom pritisku. Ovaj instrument ima mogućnost paralelnog merenja i gustine i brzine prostiranja zvuka u uzorku, tako da je i brzina zvuka merena na ovom instrumentu, na atmosferskom pritisku i sa preciznošću od 0,1 m·s⁻¹. Na instrumentu Stabinger SVM 3000/G2 viskometar, proizvođača Anton Paar, (sa preciznošću od 0,1% izmerene vrednosti), merena je viskoznost na atmosferskom pritisku, dok je Anton Paar RXA-156 refraktometar korišćen za merenje indeksa refrakcije na atmosferskom pritisku, sa preciznošću od $2 \cdot 10^{-5}$. Vaga Mettler AG 204, preciznosti 10^{-4} g korišćena je za merenje mase, na osnovu čega su određeni sastavi binarnih smeša.

Za ispitivanje i analizu međumolekulskih interakcija urađena je FT-IR analiza. Na osnovu FT-IR analize mogu se odrediti funkcionalne grupe, postojanje jednostrukih i višestrukih veza, i način povezivanja atoma u molekulu. FT-IR analiza takođe ukazuje na međumolekulske interakcije, što je od velikog značaja za razumevanje ponašanja, kako čistih komponenti tako i smeša.

Za modelovanje međumolekulskih interakcija primenjene su kvantno mehaničke metode koje se u literaturi standardno koriste za modelovanje ovih interakcija. Korišćena je CCSD(T)/CBS metoda koja se zbog izuzetne tačnosti smatra zlatnim standardom u kvantnoj hemiji. Pored toga su korišćene MP2 metoda i različite DFT metode sa D3 i D3BJ disperzionim korekcijama. U cilju dobijanja veoma tačnih rezultata ispitan je veliki broj metoda u kombinaciji sa nekoliko baznih skupova, pa su pronađene metode i bazni skupovi koji daju veoma pouzdane rezultate za ispitivane sisteme sa zasićenim i nezasićenim vezama.

3.4. Primenljivost ostvarenih rezultata

Rezultati prikazani u ovoj doktorskoj disertaciji su veoma primenljivi, projektovanje procesa i postrojenja zahtevaju precizne podatke o gustinama, viskoznosti i drugim veličinama ispitivanih supstanci pri različitim uslovima. Pošto se ispitivane supstance koriste u industrijskoj proizvodnji, poznavanje termodinamičkih i strukturnih svojstava i njihovih smeša pri različitim temperaturnim uslovima je neophodno za njihovu komercijalnu upotrebu.

Takođe, predstavljena metodologija i korišćenje kvantno mehaničkih metoda za tumačenje i analizu međumolekulskih interakcija može da se primeni u budućim proučavanjima sistema drugih smeša.

3.5. Ocena dostignutih sposobnosti kandidata za samostalni naučni rad

Kandidat **Milana M. Zarić** je angažovana u naučno-istraživačkom radu od trenutka zaposlenja na Inovacionom centru Tehnološko-metalurškog fakulteta, Univerziteta u Beogradu, na projektu finansiranom od strane Ministarstva prosvete, nauke i tehnološkog razvoja.

U toku izrade doktorske disertacije pod nazivom **“Eksperimentalno određivanje volumetrijskih i strukturnih svojstava i modelovanje smeša nezasićenih organskih jedinjenja”**, kandidat je iskazao stručnost i samostalnost u svim fazama izrade teze, što podrazumeva analitičnost, sistematičnost i preciznost u radu, pružajući značajan naučni doprinos u naučnim oblastima što potvrđuju objavljeni radovi i saopštenja na konferencijama.

Na osnovu iznetih činjenica, Komisija je mišljenja da je Kandidat kvalifikovan i da poseduje sve kvalitete koji su neophodni za samostalan naučno-istraživački rad.

4. OSTVARENI NAUČNI DOPRINOS

4.1. Prikaz ostvarenih naučnih doprinosa

Doktorska disertacija kandidata **Milane M. Zarić**, dipl. inž. tehnologije pod naslovom: **“Eksperimentalno određivanje volumetrijskih i strukturnih svojstava i modelovanje smeša nezasićenih organskih jedinjenja”** pruža značajan naučni doprinos u okviru određivanja strukturnih svojstava supstanci i njihovih smeša, kao i u oblasti upotrebe kvantno mehaničkih metoda za opisivanje interakcija ispitivanih organskih molekula, pri čemu se može izdvojiti sledeće:

- proširene su baze termodinamičkih podataka novim podacima o termodinamičkim veličinama (gustini, viskoznosti, indeksi refrakcije i brzine prostiranja zvuka) *cis*-3-heksen-1-ol za temperaturni interval od 288,15 K do 318,15 K,
- proširene su baze termodinamičkih podataka novim podacima o termodinamičkim veličinama (gustini, viskoznosti, indeksi refrakcije i brzine prostiranja zvuka) za smešu *cis*-3-heksen-1-ol + heksan za temperaturni interval od 288,15 K do 318,15 K i određene su dopunske veličine za ovu smešu,
- određen je uticaj temperature na termodinamička svojstva ispitivanih smeša, zasićenih i nezasićenih alkohola,
- određena su termodinamička i strukturna svojstva zasićenih i nezasićenih alkohola u smešama i analizirane njihove razlike u dopunskim veličinama, kao i razlike u međumolekulskim interakcijama
- je metodologija za kvantno-mehaničke proračune nekovalentnih interakcija jedinjenja sa dvostrukim vezama nalaženjem metoda koje daju najpouzdanije rezultate
- uvedena je metodologija kombinovanja eksperimentalnog ispitivanja strukturnih svojstava i teorijskog modelovanja međumolekulskih interakcija,
- određen je uticaj dvostrukih i jednostrukih veza na osnovu analize međumolekulskih interakcija

4.2. Kritička analiza rezultata istraživanja

Značajan doprinos ove doktorske disertacije je u eksperimentalnom ispitivanju supstanci, koje se koriste u industrijskim procesima, a u ovoj doktorskoj disertaciji njihova termodinamička svojstva su prvi put ispitivana. Takođe, pored termodinamičkih veličina (gustine, viskoznosti, indeksa refrakcije i brzine prostiranja zvuka), određene su i dopunske veličine ispitivanih binarnih smeša.

Pored toga, značajan naučni doprinos je i u uspostavljanju metodologije obrade eksperimentalnih rezultata kombinovanjem sa teorijskim metodama kvantno mehaničkog modelovanja međumolekulskih interakcija. Potvrđeno je da korišćenje kvantno mehaničke analize može značajno da doprinese dodatnom razumevanju i tumačenju volumetrijskih i strukturnih svojstava smeša, kao i predviđanje ponašanja ovakvih smeša.

Naučni doprinosi koje daje ova doktorska disertacija pružaju mogućnost i za buduća istraživanja u oblasti ispitivanja sličnih smeša.

4.3. Verifikacija naučnih doprinosa

Kandidat **Milana M. Zarić** je objavila ili prezentovala dvadeset radova i saopštenja i to: 1 rad u vrhunskom međunarodnom časopisu (M21), 1 rada u međunarodnom časopisu (M23), 2 saopštenja sa međunarodnih skupova štampanih u celini (M33), 2 saopštenja sa međunarodnih skupova

štampanih u izvodu (M34) i 1 saopštenja sa skupova nacionalnog značaja štampana u celini (M63), čime je verifikovala naučni doprinos svoje doktorske teze.

Kategorija 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** (2), 2016, pp. 317-324 (IF (2016)=3.075; ISSN: 1439-4235), DOI: 10.1002/cphc.201500592

Kategorija M23:

1. M. M. Zarić, B. Bugarski, M. Lj. Kijevčanin, Best methods for calculating interaction energies in 2-butene and butane systems, *Comput. Theor. Chem.*, **1117**, 2017, pp. 150-161. (IF (2016)=1.549; ISSN: 2210-271X), DOI: 10.1016/j.comptc.2017.08.001
2. M. M. Zarić, M. Stijepović, P. Linke, J. Stajic-Trošić, B. Bugarski, M. Lj. Kijevčanin, Targeting heat recovery and reuse in industrial zone, *Chem. Ind. Chem. Eng. Q.*, **23** (1), 2017, pp 73-82 (IF (2016)=0.664; ISSN: 1451-9372), DOI: 10.2298/CICEQ150622009Z

Kategorija M33:

1. M. M. Zarić, B. Bugarski, V. Pavelkić, M. Pantovic, J. Stevanovic, M. M. Pavlovic, M. Kijevčanin, Benchmark study for 2-butene parallel interactions, Physical Chemistry 2016 – 13th. International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry, Proceedings, Volume 1, pp. 75-78, ISBN 978-86-82475-34-7, Belgrade, Serbia, September 26-30. 2016.
2. M. M. Zarić, M. R. Pantović, O. Radulović, V. Pavelkić, B. Bugarski, M. Kijevčanin, Interactions in materials with saturated and unsaturated molecule, 18. YUCORR International conference “Meeting Point of the Science and Practice in the Fields of Corrosion, Materials and Environmental Protection”, Proceedings, CD, pp. 277-282, ISBN 978-86-82343-24-0, Tara Mountain, Serbia, April 12-15. 2016.

Kategorija M34:

1. M. M. Zarić, Mirjana Lj. Kijevčanin, Experimental and theoretical study on *cis*- and *trans*-isomers, 30th Processing, International congress on process industry, Book of Abstracts, p 84, Belgrade, 1-2 June 2017. Society for Process Engineering of the Serbian Union of Mechanical and Electrical Engineers and Technicians (SMEITS)
2. M. M. Zarić, B. Bugarski, V. Pavelkić, M. Pantovic, J. Stojvanovic, M. Pavlovic, M. Kijevčanin Benchmark study for systems with double and single bonds, XXIV Congress of Chemists and Technologists of Macedonia, p. 247, ISBN 978-9989-760-13-6, Ohrid, Macedonia, 11-14. September 2016.

Kategorija M63:

1. M. M. Zarić, B. Bugarski, M. Lj. Kijevčanin, Experimental measurements of thermophysical properties of the binary system *cis*-3-hexen-1-ol + hexane and FT-IR analysis, 54th Meeting of the Serbian Chemical Society, HI03, Book of Abstracts, p. 117-121, ISBN 978-86-7132-067-2, Belgrade, Serbia, 29-30. September 2017.

5. ZAKLJUČAK I PREDLOG

Na osnovu prethodno navedenog, mišljenje Komisije je da doktorska disertacija, kandidata **Milane M. Zarić**, dipl. inž. tehnologije, pod naslovom: **“Eksperimentalno određivanje volumetrijskih i strukturnih svojstava i modelovanje smeša nezasićenih organskih jedinjenja”** predstavlja originalan naučni doprinos predmetne oblasti istraživanja. Originalnost doktorske disertacije kandidata je potvrđena objavljivanjem više radova u časopisima međunarodnog značaja. Postavljeni predmet i ciljevi doktorske disertacije su ostvareni, na osnovu čega Komisija iznosi svoje mišljenje da doktorska disertacija pod nazivom **“Eksperimentalno određivanje volumetrijskih i strukturnih svojstava i modelovanje smeša nezasićenih organskih jedinjenja”** u potpunosti ispunjava sve zahtevane kriterijume, kao i da je kandidat tokom izrade disertacije pokazao samostalnost i originalnost u naučno-istraživačkom radu.

Imajući u vidu kvalitet, obim i naučni doprinos postignutih i prikazanih rezultata, Komisija predlaže Nastavno-naučnom veću Tehnološko-metalurškog fakulteta, Univerziteta u Beogradu, da prihvati ovaj Referat, pruži na uvid javnosti podnetu doktorsku disertaciju kandidata **Milane M. Zarić**, dipl. inž. tehnologije u zakonom predviđenom roku, kao i da Referat uputi Veću naučnih oblasti tehničkih nauka Univerziteta u Beogradu i da nakon završetka procedure pozove Kandidata na usmenu odbranu disertacije pred Komisijom u istom sastavu.

ČLANOVI KOMISIJE

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

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

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

.....
Dr Vesna Medaković, docent
Univerzitet u Beogradu, Hemijski fakultet