

ТЕХНОЛОШКО-МЕТАЛУРШКИ
ФАКУЛТЕТ
35/27
(Број захтева)

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

14.02.2019.
(Датум)

ЗАХТЕВ

за давање сагласности на предлог теме докторске дисертације

Молимо да, сходно члану 47. ст. 5. тач. 3. Статута Универзитета у Београду („Гласник Универзитета“, број 131/06), дате сагласност на предлог теме докторске дисертације:

„Термодинамичка карактеризација електролитних система са фосфатним јонима“

(пун назив предложене теме докторске дисертације)

НАУЧНА ОБЛАСТ: ТЕХНОЛОШКО ИНЖЕЊЕРСТВО

ПОДАЦИ О КАНДИДАТУ:

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

ТИЈАНА (Горан) ИВАНОВИЋ, мастер инжењер технологије

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

3. Година дипломирања: 2012.

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

5. Година дипломирања: 2015.

Студент је уписан на докторске академске студије школске 2015/2016. године.

Обавештавамо Вас да је Наставно-научно веће, на седници одржаној 31.01.2019. године размотрило предложену тему и закључило да је тема подобна за израду докторске дисертације.

ДЕКАН ФАКУЛТЕТА

Проф. др Петар Ускоковић

Прилог:

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

ПОДАЦИ О МЕНТОРУ

за кандидата Тијану Ивановић

Име и презиме ментора: Јелена Миладиновић

Звање: редовни професор

Списак радова који квалификују ментора за вођење докторске дисертације:

1. Daniela Ž. Popović, Jelena Miladinović, Milica D. Todorović, Milorad M. Zrilić, Joseph A. Rard » Isopiestic determination of the osmotic and activity coefficients of the $\{y \text{ KCl} + (1 - y) \text{ K}_2\text{HPO}_4\}(\text{aq})$ system at $T = 298.15 \text{ K}$ «, *Journal of Chemical Thermodynamics*, **43** (12) (2011) 1877-1885. ISSN 0021-9614 IF 2011: 2.422 (2011: Thermodynamics 6/52)
2. Daniela Ž. Popović, Jelena Miladinović, Zoran P. Miladinović, Branislav B. Ivošević, Milica D. Todorović, Joseph A. Rard » Isopiestic determination of the osmotic and activity coefficients of the $\{y \text{ KNO}_3 + (1 - y) \text{ K}_2\text{HPO}_4\}(\text{aq})$ system at $T = 298.15 \text{ K}$ «, *Journal of Chemical Thermodynamics*, **55** (2012) 172-183. ISSN 0021-9614 IF 2012: 2.297 (2012: Thermodynamics 9/55)
3. Daniela Ž. Popović, Jelena Miladinović, Zoran P. Miladinović, Snežana R. Grujić, Milica D. Todorović, Joseph A. Rard » Isopiestic determination of the osmotic and activity coefficients of the $\{y \text{ KBr} + (1 - y) \text{ K}_2\text{HPO}_4\}(\text{aq})$ system at $T = 298.15 \text{ K}$ «, *Journal of Chemical Thermodynamics*, **62** (2013) 151-161. ISSN 0021-9614 IF 2013: 2.423 (2013: Thermodynamics 9/55)
4. Daniela Ž. Popović, Jelena Miladinović, Joseph A. Rard, Zoran P. Miladinović, Snežana R. Grujić, » Isopiestic determination of the osmotic and activity coefficients of the $\{y \text{ K}_2\text{SO}_4 + (1 - y) \text{ K}_2\text{HPO}_4\}(\text{aq})$ system at $T = 298.15 \text{ K}$ «, *Journal of Chemical Thermodynamics*, **79** (2014) 84-93. ISSN 0021-9614 IF 2013: 2.423 (2013: Thermodynamics 9/55)
5. Tijana Ivanović, Daniela Popović, Joseph A. Rard, Snežana Grujić, Zoran P. Miladinović, Jelena Miladinović, „Isopiestic determination of the osmotic and activity coefficients of the $\{y \text{ Mg}(\text{NO}_3)_2 + (1 - y) \text{ MgSO}_4\}(\text{aq})$ system at $T = 298.15 \text{ K}$ «, *Journal of Chemical Thermodynamics*, **113** (2017) 91-103. ISSN 0021-9614 IF 2016: 2.784 (2016: Thermodynamics 12/58)

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 односне 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: 23.01.2019. год.

М.П.

Проф. др Петар Ускоковић

На основу чл. 40. став 3. Закона о високом образовању, чл. 112. став 3. Статута Универзитета у Београду, чл. 88. став 3. Статута ТМФ-а и чл. 31. и 32 Правилника о докторским студијама ТМФ-а, на седници Наставно-научног већа Технолошко-металуршког факултета од 31.01.2019. 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 Тијани Ивановић, мастер инжењеру технологије, под називом: **„Термодинамичка карактеризација електролитних система са фосфатним јонима“**.

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

За ментора се одређује др Јелена Миладиновић, редовни професор Универзитета у Београду, Технолошко-металуршки факултет.

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

Д Е К А Н

Проф. др Петар Ускоковић

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

Predmet: Podobnost teme i kandidata Tijane (Goran) Ivanović, master inženjera tehnologije, za izradu doktorske disertacije

Odlukom Nastavno–naučnog veća Tehnološko-metalurškog fakulteta, br. 35/469 od 06. 12. 2018. godine, imenovani smo za članove Komisije za ocenu podobnosti teme i kandidata Tijane (Goran) Ivanović za izradu doktorske disertacije i naučne zasnovanosti teme pod nazivom: „**Termodinamička karakterizacija elektrolitnih sistema sa fosfatnim jonima**“. Na osnovu materijala priloženog uz zahtev kandidata, Komisija podnosi sledeći

REFERAT

1. Podaci o kandidatu

1.1. Biografski podaci

Tijana (Goran) Ivanović (devojačko prezime Kerić) je rođena 12. 09. 1987. godine u Kragujevcu, Republika Srbija. Osnovnu školu, kao nosilac Vukove diplome, i nižu muzičku školu završila je 2002. godine, a 2006. godine srednju medicinsku školu sa odličnim uspehom. Tehnološko-metalurški fakultet na Univerzitetu u Beogradu upisala je školske 2006/2007. godine. Diplomirala je 2012. godine sa završnim radom na temu: „Ispitivanje mogućnosti uklanjanja anjonskih boja iz vodenih rastvora adsorpcijom na amino-funkcionalizovanom kiselinski aktiviranom sepiolitu“ sa ocenom 10 kod prof. dr Rade Petrović. Master studije na Tehnološko-metalurškom fakultetu je upisala školske 2012/2013. godine. Završni master rad pod nazivom: „Uklanjanje arsena i fosfata iz vode adsorpcijom na modifikovanom, kiselinski aktiviranom sepiolitu“ je odbranila 2015. godine sa ocenom 10 kod prof. dr Rade Petrović. Školske 2015/2016. godine upisala je doktorske studije na Tehnološko-metalurškom fakultetu na studijskom programu Hemijsko inženjerstvo pod mentorstvom prof. dr Jelene Miladinović. Od aprila 2016. godine zaposlena je u Institutu za multidisciplinarna istraživanja, kao istraživač pripravnik, pod mentorstvom dr Miroslava Komljenovića, naučnog savetnika.

1.2. Stečeno naučno–istraživačko iskustvo

U toku doktorskih studija Tijana Ivanović je položila sve ispite predviđene studijskim programom sa prosečnom ocenom 9,75. Završni ispit pod nazivom: „Koeficijenti aktivnosti sistema $\{y\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 + (1-y) \text{MgSO}_4\}(\text{aq})$ na $T = (298,15 \pm 0,01) \text{ K}$ “ je odbranila u junu 2018. godine sa ocenom 10.

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

Naziv predmeta	Ocena	Broj ESPB bodova
Termodinamika rastvora elektrolita	10	4
Hemijska termodinamika	10	5
Fenomeni prenosa u inženjerstvu materijala	10	5
Fazna ravnoteža u višekomponentnim sistemima	10	4
Teorijski osnovi keramike i stakla	10	5
Viši kurs analitičke hemije	10	5
Principi fizičkih i hemijskih postupaka tretmana voda	10	5
Sinteza svojstva i primena biokeramičkih materijala	10	4
Struktura stakla i staklastih materijala	10	5
Teorija procesa sagorevanja	10	6
Odabrana poglavlja numeričke analize	7	5
Završni ispit	10	30
Srednja ocena/ukupno	9,75	83

Kandidat je učesnik nacionalnog projekta Ministarstva nauke, prosvete i tehnološkog razvoja (TR34026), kao i dva međunarodna projekta (DS-2016-0051 i SPS985402).

U okviru COST (European Cooperation in Science and Technology) akcije TU1301 (Norm for Building materials) 2016. godine u Atini, Tijana Ivanović je učestvovala u treningu namenjenom mladim istraživačima, koji se odnosi na primenu prirodnih i industrijski otpadnih materijala u građevinarstvu. U okviru COST akcije TU1301 boravila je i u Ljubljani (Zavod za gradbeništvo Slovenije) januara 2017. godine. Takođe je u periodu od marta do septembra 2017. godine bila na stručnom usavršavanju na Univerzitetu u Luvenu (Belgija) na odseku za nauku o materijalima, pod mentorstvom dr Yiannis Pontikes-a, redovnog profesora.

Tijana Ivanović je koautor tri rada objavljena u vodećem međunarodnom časopisu (M21), jednog rada objavljenog u međunarodnom časopisu (M23) kao i jednog tehničkog rešenja (M85).

Spisak objavljenih naučnih radova i saopštenja

Radovi u vrhunskom međunarodnom časopisu (M21)

1. **Ivanović T.**, Popović D., Rard J., Grujić S., Miladinović Z., Miladinović J.: „Isopiestic determination of the osmotic and activity coefficients of the $\{y\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 + (1 - y)\text{MgSO}_4\}(\text{aq})$ system at $T = 298.15 \text{ K}$ “, The Journal of Chemical Thermodynamics, **113** (2017) pp. 91-103, ISSN: 0021-9614, IF: 2,631 (2017).
2. Nikolić V., Komljenović M., Džunuzović N., **Ivanović T.**, Miladinović Z.: „Immobilization of hexavalent chromium by fly ash-based geopolymers“, Composites Part B, **112** (2017) pp. 213-223, ISSN: 1359-8368, IF: 4,920 (2017).
3. Džunuzovic N., Komljenovic M., Nikolic V., **Ivanovic T.**: „External sulfate attack on alkali-activated fly ash-blast furnace slag composite“, Construction and Building Materials, **157** (2017) pp. 737–747, ISSN: 0950-0618, IF: 3,485 (2017).

Rad u međunarodnom časopisu (M23)

4. **Ivanović T.**, Popović D., Rard A. Joseph, Miladinović J., Miladinović Z., Belosevic S., Trivunac K.: “Isopiestic Determination of the Osmotic and Activity Coefficients of the $\{y\text{NaH}_2\text{PO}_4 + (1 - y)\text{KH}_2\text{PO}_4\}(\text{aq})$ System at $T = 298.15 \text{ K}$ “, Journal of Solution Chemistry, DOI 10.1007/s10953-018-0839-4, ISSN: 0095-9782, IF: 1,401 (2017).

Tehničko rešenje (M85)

5. Džunuzović N., Komljenović M., Nikolić V., Petrašinović–Stojkanović Lj., **Ivanović T.**, Ršumović T., „Tehnološki postupak dobijanja alkalno aktiviranih kompozita otpornih na dejstvo hemijski agresivne sredine. “ Rezultat je ostvaren u okviru projekta: „GEOPOLIMERI – Razvoj tehnologije za konverziju industrijskog otpada u funkcionalne materijale “ TR34026.

1.3. Ocena podobnosti kandidata za rad na predloženoj temi

Na osnovu biografskih podataka i rezultata pokazanih tokom doktorskih studija i u okviru naučno–istraživačkog rada, može se zaključiti da je reč o kandidatu koji je veoma sposoban i zainteresovan, na šta ukazuju i radovi koje je kandidat do sada objavio u međunarodnim časopisima. Komisija ocenjuje da kandidat ispunjava sve potrebne uslove za rad na predloženoj temi.

2. Predmet i cilj istraživanja

Predmet naučnog istraživanja u ovoj tezi su termodinamička svojstva višekomponentnih rastvora elektrolita koji sadrže fosfatne jone. U tu svrhu će biti korišćene različite eksperimentalne tehnike a dobijeni rezultati će biti obrađeni različitim termodinamičkim modelima.

Višekomponentni rastvori elektrolita imaju značajnu ulogu u hemijskoj industriji, u hidrometalurgiji i geohemiji. Poznavanje termodinamičkih svojstava elektrolitnih sistema je važno za proučavanje i razumevanje teorije rastvora elektrolita kao i za upravljanje, projektovanje, simulaciju i modelovanje tehnoloških postupaka proizvodnje i uređaja u hemijskoj industriji a naročito u tehnologiji neorganskih soli.

Proučavanje termodinamičkih osobina višekomponentnih rastvora elektrolita je od velikog značaja za opisivanje ponašanja ovih sistema u širokom opsegu koncentracija kao posledice složenih interakcija tipa jon–jon i jon–rastvarač[1]. Odstupanja od idealnosti realnih sistema se mogu kvantitativno okarakterisati koeficijentima aktivnosti elektrolita u rastvoru i osmotskim koeficijentima rastvarača[2,3]. Poznavanje ovih svojstava je korisno sa jedne strane zbog teorijskog značaja i mogućnosti određivanja veličina kao što su Gibbs–ova energija rastvora, napon pare rastvarača, elektromotorna sila reverzibilnih ćelija itd. a sa druge strane za predviđanje toka odvijanja proizvodnih procesa u tehnologiji neorganskih soli.

Natrijum i kalijum soli fosforne kiseline se javljaju kao komponente standardnih puferskih sistema koji se koriste za kalibraciju pH-metara, široko se koriste i kao izvor fosfora u đubrivima a kalijum-hidrogenfosfat i kao aditiv hrani posebno za sprečavanje koagulacije proteina. U prirodnim vodama se fosfati mogu naći u umerenim koncentracijama.

Naglašena je potreba za pouzdanim i preciznim podacima osobina vodenih rastvora elektrolita natrijum– i kalijum–hidrogenfosfata i dihidrogenfosfata kao i različitih smeša ovih soli. Od interesa su termodinamička svojstva kao što su osmotski koeficijenti i koeficijenti aktivnosti elektrolita ali i rastvorljivost kako u čistim tako i u mešanim rastvorima na $T = 298,15 \text{ K}$ i standardnom pritisku[4,5]. Dosadašnja istraživanja i termodinamička karakterizacija fosfatnih sistema se odnosila na mešane vodene rastvore K_2HPO_4 sa KCl [6], KBr [7] i KNO_3 [8] u oblasti umerenih koncentracija rastvora pri različitim udelima jonske jačine elektrolita. Takođe se mogu naći i podaci za osmotske koeficijente dvokomponentnih rastvora $\text{Na}_2\text{HPO}_4(\text{aq})$, $\text{K}_2\text{HPO}_4(\text{aq})$, $\text{NaH}_2\text{PO}_4(\text{aq})$ i $\text{KH}_2\text{PO}_4(\text{aq})$ ali na povišenim temperaturama od $383,15 \text{ K}$ do $523,15 \text{ K}$ [9].

Zbog očiglednog nedostatka termodinamičkih podataka i detaljne karakterizacije elektrolitnih sistema sa fosfatnim jonima, u doktorskoj disertaciji će biti proučavana svojstva sistema kao što su $\{y\text{NaH}_2\text{PO}_4 + (1 - y)\text{KH}_2\text{PO}_4\}(\text{aq})$, $\{y\text{NaH}_2\text{PO}_4 + (1 - y)\text{Na}_2\text{HPO}_4\}(\text{aq})$ i $\{y\text{KH}_2\text{PO}_4 + (1 - y)\text{K}_2\text{HPO}_4\}(\text{aq})$ na $T = 298,15 \text{ K}$ i standardnom pritisku.

Eksperimentalna merenja će obuhvatiti primenu izopiestičke metode za određivanje osmotskih koeficijenata čistih i mešanih rastvora kao i za određivanje rastvorljivosti soli u ovim rastvorima na $T = 298,15 \text{ K}$. Osmotski koeficijenti fosfatnih sistema biće određeni u širokom opsegu jonske jačine rastvora i pri različitim udelima jonske jačine elektrolita. Nadalje, u cilju modelovanja svojstava ispitivanih termodinamičkih sistema biće korišćena i merenja elektromotorne sile čime će se steći uvid u ponašanje koeficijenata aktivnosti elektrolita u oblasti niskih koncentracija rastvora.

Na osnovu obrade eksperimentalnih rezultata primenom različitih termodinamičkih modela na podatke kako dvokomponentnih $\text{Na}_2\text{HPO}_4(\text{aq})$, $\text{K}_2\text{HPO}_4(\text{aq})$, $\text{NaH}_2\text{PO}_4(\text{aq})$, $\text{KH}_2\text{PO}_4(\text{aq})$

tako i trokomponentnih rastvora elektrolita, njihovih smeša, biće određeni parametri modela i proračunate vrednosti koeficijenta aktivnosti u širokom opsegu koncentracija rastvora od razblaženih do granice zasićenja. Za modelovanje će biti korišćeni različiti modeli od kojih model na bazi molskih udela, Pitzer–Simonson–a[10] koji je proširen od strane Clegg–a[11] daje izuzetne rezultate. Razmatranjem rastvorljivosti soli u dvo– i trokomponentnim rastvorima fosfatnih sistema omogućiće i proveru termodinamičkih podataka za standardne Gibbs–ove energije formiranja različitih soli kako anhidrita tako i kristalohidrata.

Literatura

- [1] K. S. Pitzer, in: K. S. Pitzer (Ed.), *Activity Coefficients in Electrolyte Solutions*, second ed., CRC Press, Boca Raton, 1991 (Chapter 3).
- [2] Todorović M., Ninković R., Osmotic and activity coefficients of $\{x\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 + (1-x)\text{MgSO}_4\}(\text{aq})$ at the temperature 298.15 K, *J. Chem. Thermodyn.*, **27** (1995) 369–375.
- [3] Miladinović J., Ninković R., Todorović M. D., Rard Joseph A., Isopiestic investigation of the osmotic and activity coefficients of $\{y\text{MgCl}_2 + (1-y)\text{MgSO}_4\}(\text{aq})$ and the osmotic coefficients of $\text{Na}_2\text{SO}_4\cdot\text{MgSO}_4(\text{aq})$ at 298.15 K, *J. Solution Chem.*, **37** (2008) 307–329.
- [4] Cox, J. D., Wagman, D. D., Medvedev, V. A.: *CODATA Key Values for Thermodynamics*. Hemisphere, New York (1989).
- [5] Rard, J. A., Wolery, T. J., The standard chemical-thermodynamic properties of phosphorus and some of its key compounds and aqueous species: An evaluation of differences between the previous recommendations of NBS/NIST and CODATA, *J. Solution Chem.*, **36**, (2007) 1585–1599.
- [6] Popović Daniela Ž., Miladinović Jelena, Todorović Milica D., Zrilić Milorad M., Rard Joseph A., Isopiestic determination of the osmotic and activity coefficients of the $\{y\text{KCl} + (1-y)\text{K}_2\text{HPO}_4\}(\text{aq})$ system at $T = 298.15\text{ K}$, *J. Chem. Thermodyn.*, **43** (12) (2011) 1877–1885.
- [7] Popović Daniela Ž., Miladinović Jelena, Miladinović Zoran P., Grujić Snežana R., Todorović Milica D., Rard Joseph A., Isopiestic determination of the osmotic and activity coefficients of the $\{y\text{KBr} + (1-y)\text{K}_2\text{HPO}_4\}(\text{aq})$ system at $T = 298.15\text{ K}$, *J. Chem. Thermodyn.*, **62** (2013) 151–161.
- [8] Popović Daniela Ž., Miladinović Jelena, Miladinović Zoran P., Ivošević Branislav B., Todorović Milica D., Rard Joseph A., Isopiestic determination of the osmotic and activity coefficients of the $\{y\text{KNO}_3 + (1-y)\text{K}_2\text{HPO}_4\}(\text{aq})$ system at $T = 298.15\text{ K}$, *J. Chem. Thermodyn.*, **55** (2012) 172–183.

- [9] Holmes, H. F., Simonson, J. M., Mesmer, R. E., Aqueous solutions of the mono- and di-hydrogenphosphate salts of sodium and potassium at elevated temperatures. Isopiestic results, *J. Chem. Thermodyn.*, **32** (2000) 77–96.
- [10] Pitzer K. S., Simonson J. M., Thermodynamics of multicomponent, miscible, ionic systems: theory and equations, *J. Phys. Chem.*, **90** (1986) 3005-3009.
- [11] Clegg, S. L., Pitzer, K. S., Brimblecombe, P., Thermodynamics of multicomponent, miscible, ionic solutions. 2. Mixtures including unsymmetrical electrolytes, *J. Phys. Chem.* **96** (1992) 9470–9479; Corrections **98** (1994) 1368.

3. Polazne hipoteze

S obzirom na značaj elektrolitnih sistema sa fosfatnim jonima a na osnovu uvida u dosadašnja istraživanja iz oblasti termodinamike čistih i mešanih rastvora koji sadrže različite oblike fosfatnih jona u ravnoteži sa kalijum i/ili natrijum jonima, utvrđeno je da se mogu naći podaci za neke od fosfatnih sistema u umerenoj oblasti koncentracija i to na povišenim temperaturama a da su podaci na temperaturi 298,15 K oskudni, naročito u oblasti sastava bliskoj granici zasićenja pojedinim solima kao i u delu koji pripada razblaženim rastvorima. Stoga će u doktorskoj disertaciji biti izvedena termodinamička karakterizacija fosfatnih sistema sa ciljem proširenja fonda podataka o osmotskim koeficijentima, srednjim jonskim koeficijentima aktivnosti, dopunskoj Gibbs–ovoj energiji rastvora i rastvorljivosti soli kako u čistim tako i u mešanim rastvorima elektrolita. S tim u vezi, biće izvedena serija eksperimenata radi određivanja osmotskih koeficijenata dvokomponentnih sistema: $\text{Na}_2\text{HPO}_4(\text{aq})$, $\text{K}_2\text{HPO}_4(\text{aq})$, $\text{NaH}_2\text{PO}_4(\text{aq})$ i $\text{KH}_2\text{PO}_4(\text{aq})$ kao i trokomponentnih sistema: $\{y\text{NaH}_2\text{PO}_4 + (1 - y)\text{KH}_2\text{PO}_4\}(\text{aq})$, $\{y\text{NaH}_2\text{PO}_4 + (1 - y)\text{Na}_2\text{HPO}_4\}(\text{aq})$ i $\{y\text{KH}_2\text{PO}_4 + (1 - y)\text{K}_2\text{HPO}_4\}(\text{aq})$ na $T = 298,15 \text{ K}$.

U oblasti razblaženih rastvora radi određivanja koeficijenata aktivnosti elektrolita u ispitivanim sistemima biće korišćena metoda merenja elektromotorne sile elektrohemijskih ćelija sa jon-selektivnim elektrodama. Pored toga, usled potrebe za preciznim podacima o rastvorljivosti različitih soli kako u čistim tako i u mešanim rastvorima u vodi na $T = 298,15 \text{ K}$ i mogućim oblicima čvrste faze u metastabilnoj i stabilnoj ravnoteži sa zasićenim rastvorima biće izvedena dodatna merenja primenom izopiesticke metode.

Može se pretpostaviti da će se na osnovu dobijenih eksperimentalnih rezultata steći bolji uvid u ponašanje ispitivanih fosfatnih sistema u širokom opsegu koncentracija. Eksperimentalni podaci će biti obrađeni primenom termodinamičkih modela u skali molalnosti i molskih udela i biće određeni parametri modela kojima je moguće izvesti proračun koeficijenata aktivnosti kao i dopunske Gibbs–ove energije rastvora. Nadalje, procenjeni parametri modela mogu poslužiti za proveru valjanosti primenjenih metoda za karakterizaciju svojstava ispitivanih sistema, izopiesticke metode i metode merenja elektromotorne sile. Na osnovu podataka za rastvorljivost soli u ispitivanim dvo- i

trokomponentnim sistemima biće moguće proceniti i korigovati podatke za standardne Gibbs–ove energije formiranja soli koje se javljaju u ravnoteži sa zasićenim čistim i mešanim rastvorima.

Razmatranjem ponašanja koeficijenata aktivnosti u razmatranim sistemima u zavisnosti od koncentracije rastvora i udela u jonskoj jačini elektrolita biće proučavane i interakcije tipa: $\text{Na}^+ - \text{HPO}_4^{2-}$, $\text{K}^+ - \text{HPO}_4^{2-}$, $\text{Na}^+ - \text{H}_2\text{PO}_4^-$, $\text{K}^+ - \text{H}_2\text{PO}_4^-$, $\text{H}_2\text{PO}_4^- - \text{HPO}_4^{2-}$, $\text{K}^+ - \text{Na}^+$. Može se pretpostaviti da će se na osnovu dobijenih rezultata steći bolji uvid u teoriju rastvora ovih sistema, i da će moći da se objasne pojave koje se u njima javljaju kao posledica interakcija i složene strukture.

4. Naučne metode istraživanja

Metode istraživanja obuhvataju eksperimentalna merenja osmotskih koeficijenata primenom izopiastičke metode na aparaturi koja je posebno konstruisana i unapređena u tu svrhu. Zasniva se na izjednačavanju aktivnosti rastvarača u referentnom i ispitivanim rastvorima, kada je sistem u ravnoteži na određenoj temperaturi i pritisku. Radi regulacije temperature medijuma tokom izopiastičkih merenja biće korišćen Julabo SE–Z uranjajući termostat sa kontrolom temperature $\pm 0,01$ K. Izopiastička aparatura će biti korišćena i za određivanje granice rastvorljivosti u čistim i krivih rastvorljivosti u mešanim rastvorima uz male adaptacije postupka merenja.

Metoda merenja elektromotorne sile će biti korišćena u cilju određivanja srednjih jonskih koeficijenata aktivnosti elektrolita u ćeliji sa jon–selektivnim elektrodama tipa ORION i HANNA instruments, dok će napon ćelije biti registrovan uređajem Keithley Instruments Series 2400 ($5 \mu\text{V} - 210 \text{ V}$) za oblast razblaženih rastvora. Sastavi smeša će biti određeni posebnim postupkom uz merenja mase, vagom tipa Mettler Toledo MS105DU, preciznosti $\pm 10^{-5}$ g. Za određivanje molalnosti osnovnih rastvora, koji su konstituenti mešanih, biće korišćene klasične analitičke metode. Za potrebe obrade eksperimentalnih podataka, predviđanje i proračun koeficijenata aktivnosti koristiće se termodinamički modeli razvijeni u programskom paketu Matlab.

5. Očekivani naučni doprinos

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

- pouzdano će biti određena termodinamička svojstva izabranih elektrolitnih sistema sa fosfatnim jonima primenom različitih metoda;
- biće proširena termodinamička baza podataka novim, pouzdanim eksperimentalnim podacima za osmotske koeficijente izabranih dvo– i trokomponentnih fosfatnih sistema u umerenoj oblasti koncentracija rastvora kao i podacima za koeficijente aktivnosti dobijene merenjem elektromotorne sile u oblasti razblaženih rastvora;
- biće određena termodinamička svojstva kao što su srednji jonski koeficijent aktivnosti elektrolita u sistemima: $\{y\text{NaH}_2\text{PO}_4 + (1 - y)\text{KH}_2\text{PO}_4\}(\text{aq})$, $\{y\text{NaH}_2\text{PO}_4$

- + $(1 - y)\text{Na}_2\text{HPO}_4\}\text{(aq)}$ и $\{y\text{KH}_2\text{PO}_4 + (1 - y)\text{K}_2\text{HPO}_4\}\text{(aq)}$ na $T = 298,15 \text{ K}$ kao i dopunska Gibbs–ova energija rastvora;
- na osnovu razmatranja difuzione ravnoteže biće određena granica rastvorljivosti i krive rastvorljivosti soli u dvo- i trokomponentnim fosfatnim sistemima na $T = 298,15 \text{ K}$;
 - analiza složenih interakcija tipa jon–jon i jon–rastvarač će doprineti boljem razumevanju i objašnjenju pojava u ispitivanim sistemima;
 - ispitaće se i analizirati primenljivost različitih termodinamičkih modela za predviđanje, korelisanje i proračun termodinamičkih svojstava ispitivanih sistema.

6. Plan istraživanja i struktura rada

Plan istraživanja obuhvata sledeće aktivnosti: literaturni pregled prethodnih istraživanja svojstava iz oblasti termodinamike rastvora elektrolita izabranih sistema; izbor višekomponentnih sistema koji sadrže fosfatne jone za ispitivanje; eksperimentalno određivanje osmotskog koeficijenta rastvarača na $T = 298,15 \text{ K}$; eksperimentalno određivanje srednjih jonskih koeficijenata aktivnosti elektrolita u odabranim sistemima merenjem elektromotorne sile; obrada eksperimentalnih rezultata primenom odabranih termodinamičkih modela; proračun koeficijenata aktivnosti elektrolita ispitivanih rastvora i poređenje rezultata za termodinamička svojstva dobijena različitim metodama; analiza primene različitih termodinamičkih modela; analiza termodinamičkih svojstava ispitivanih rastvora na osnovu mogućih interakcija.

Imajući u vidu navedeni plan istraživanja, očekuje se da će doktorska disertacija imati sledeću strukturu: *Uvod*, *Pregled literature i teorijski deo*, *Eksperimentalni deo*, *Rezultati eksperimentalnih merenja*, *Diskusija rezultata*, *Zaključak*, *Literatura*.

U poglavlju *Uvod* će biti definisan predmet istraživanja, glavni ciljevi disertacije i doprinos disertacije.

U poglavlju *Pregled literature i teorijski deo* biće obuhvaćen pregled dosadašnjih istraživanja iz oblasti termodinamičkih svojstava višekomponentnih fosfatnih sistema kao i termodinamički modeli koji će biti korišćeni u obradi eksperimentalnih rezultata.

U okviru *Eksperimentalnog dela*, biće dat prikaz izbora i pripreme dvo- i trokomponentnih rastvora koji su korišćeni u analizi kao i opis aparatura na kojoj su rađena eksperimentalna merenja.

U okviru *Rezultata eksperimentalnih merenja* biće dati rezultati izopijskih merenja osmotskih koeficijenata kao i rastvorljivosti u ispitivanim sistemima i podaci dobijeni za srednje jonske koeficijente aktivnosti elektrolita merenjem elektromotorne sile.

Poglavljje *Diskusija rezultata* obuhvata analizu obrade eksperimentalnih rezultata kao i rezultata poređenja svojstava dobijenih različitim metodama.

Na osnovu izvedenih analiza, u poglavlju *Zaključak*, biće sumirani svi dobijeni rezultati na osnovu izvedenih istraživanja. Svi citirani navodi kao i radovi koji su nastali u toku istraživanja, nalaziće se u poglavlju *Literatura*.

7. Zaključak i predlog

Na osnovu izloženog, Komisija smatra da kandidat Tijana (Goran) Ivanović, ispunjava sve neophodne uslove za rad na predloženoj temi doktorske disertacije. Pored toga, na osnovu iznetih podataka, Komisija smatra da je tema predložene doktorske disertacije „**Termodinamička karakterizacija elektrolitnih sistema sa fosfatnim jonima**“ naučno zasnovana. Komisija predlaže Nastavno–naučnom veću Tehnološko-metalurškog fakulteta Univerziteta u Beogradu da kandidatu Tijani (Goran) Ivanović odobri izradu doktorske disertacije pod navedenim naslovom. Istraživanja u okviru ove doktorske disertacije pripadaju naučnoj oblasti Tehnološko inženjerstvo za koju je Tehnološko–metalurški fakultet Univerziteta u Beogradu, matična ustanova. Za mentora se predlaže dr Jelena Miladinović, redovni profesor Tehnološko-metalurškog fakulteta Univerziteta u Beogradu.

ČLANOVI KOMISIJE

Dr Jelena Miladinović, redovni profesor
Univerziteta u Beogradu, Tehnološko-metalurški fakultet

Dr Snežana Grujić, redovni profesor
Univerziteta u Beogradu, Tehnološko-metalurški fakultet

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

Dr Daniela Popović, naučni saradnik
Inovacioni centar Tehnološko-metalurškog fakulteta

Dr Milutin Smiljanić, naučni saradnik
Univerziteta u Beogradu, Institut za nuklearne nauke “Vinča”