

ТЕХНИЧКИ ФАКУЛТЕТ У БОРУ

УНИВЕРЗИТЕТ У БЕОГРАДУ
Веће научних области техничких наука

(Број захтева)

(Датум)

ЗАХТЕВ

за давање сагласности на одлуку о прихватању теме докторске дисертације и о одређивању ментора

Молимо да, сходно члану 47. ст. 5. тач. 3. Статута Универзитета у Београду ("Гласник Универзитета", број 186/15-пречишћени текст и 189/16), дате сагласност на одлуку о прихватању теме докторске дисертације:

МЕХАНОХЕМИЈСКА СИНТЕЗА, КАРАКТЕРИЗАЦИЈА И ФОТОКАТАЛИТИЧКА ПРИМЕНА ДОПИРАНИХ, КОДОПИРАНИХ И ХЕТЕРОСТРУКТУРНИХ НАНОКАТАЛИЗАТОРА НА БАЗИ ЦИНК-ОКСИДА

НАУЧНА ОБЛАСТ: **Технолошко инжењерство**

ПОДАЦИ О КАНДИДАТУ:

1. Име, име једног од родитеља и презиме кандидата: **Владан (Владо) Неделковски**

2. Претходно образовање (назив и седиште факултета, студијски програм):

Технички факултет у Бору, Технолошко инжењерство

3. Година завршетка претходног нивоа студија: **2021.**

4. Година уписа на докторске студије: **2021.**

5. Назив студијског програма докторских студија: **Технолошко инжењерство**

ПОДАЦИ О МЕНТОРУ:

За кандидата: **Владан В. Неделковски**

Име и презиме ментора: **Проф. др Милан Б. Радовановић**

Звање: **Редовни професор**

Универзитет у Београду, Технички факултет у Бору

Списак радова који квалификују ментора за вођење докторске дисертације:

1. Vladan Nedelkovski, Milan Radovanović, Dragana Medić, Sonja Stanković, Iosif Hulka, Dejan Tanikić, Milan Antonijević (2025): Enhancing Wastewater Treatment Through Python ANN-Guided Optimization of Photocatalysis with Boron-Doped ZnO Synthesized via Mechanochemical Route. *Processes*, 13(7), article number 2240, DOI: 10.3390/pr13072240, M22

ISSN: 2227-9717, IF (2024) = 2,8, *Engineering, Chemical*

Ključne reči: optimization, doped ZnO, nanoparticles, neural networks, photocatalysis
<https://doi.org/10.3390/pr13072240>

2. Vladan Nedelkovski, Milan Radovanović, Milan Antonijević (2025): Advances in Photocatalytic Degradation of Crystal Violet Using ZnO-Based Nanomaterials and Optimization Possibilities: A Review. *ChemEngineering*, 9(6), article number 120, DOI: 10.3390/chemengineering9060120, M22

ISSN: 2305-7084, IF (2024) = 3,4, *Engineering, Chemical*

Ključne reči: ZnO, crystal violet, photocatalytic degradation, advanced oxidation processes, artificial neural networks, wastewater treatment
<https://doi.org/10.3390/chemengineering9060120>

3. Žaklina Z. Tasić, Marija B. Petrović Mihajlović, Milan B. Radovanović, Ana T. Simonović, Dragana V. Medić and Milan M. Antonijević (2022): Electrochemical determination of L-tryptophan in food samples on graphite electrode prepared from waste batteries. *Scientific Reports*, 12, article number 5469, DOI: 10.1038/s41598-022-09472-7, M21

ISSN: 2045-2322. IF (2022) = 4,6, *Multidisciplinary Sciences*

Ključne reči: electrochemistry, sensors and biosensors
<https://doi.org/10.1038/s41598-022-09472-7>

4. Milan Radovanović, Marija Petrović Mihajlović, Žaklina Tasić, Ana Simonović, Milan Antonijević (2021): Inhibitory effect of L-Threonine and L-Lysine and influence of surfactant on stainless steel corrosion in artificial body solution. *Journal of Molecular Liquids*, 342, article number 116939, DOI: 10.1016/j.molliq.2021.116939, M21

ISSN: 0167-7322. IF(2021) = 6,633, Chemistry, Physical

Ključne reči: stainless steel, corrosion, amino acid, artificial body solution, biomaterials, AFM <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2021.116939>

5. Radovanović, Milan B., Tasić, Žaklina Z., Simonović, Ana T., Petrović Mihajlović, Marija B., Antonijević, Milan M._(2020): Corrosion Behavior of Titanium in Simulated Body Solutions with the Addition of Biomolecules. *ACS Omega*, 5 p. 12768-12776, DOI: 10.1021/acsomega.0c00390, M22

ISSN: 2470-1343, IF (2020) = 3,512, Chemistry, Multidisciplinary

Ključne reči: adenine, electrochemistry, oxidation, thymine, titanium
<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acsomega.0c00390>

Обавештавамо вас да је НАСТАВНО-НАУЧНО ВЕЋЕ ТЕХНИЧКОГ ФАКУЛТЕТА У БОРУ на седници одржаној **26.03.2026.** размотрило предложену тему и закључило да је тема подобна за израду докторске дисертације јер садржи оригиналну идеју и да је од значаја за развој науке, примену њених резултата, односно развој научне мисли уопште.

ДЕКАН ФАКУЛТЕТА

Проф. др Дејан Таникић

- Прилог
1. Одлука Наставно-научног већа о прихватању теме и одређивању ментора
 2. Извештај Комисије о оцени научне заснованости теме докторске дисертације

Напомена: Факултет доставља Универзитету захтев са прилозима у електронској форми и у једном писаном примерку за архиву Универзитета

Универзитет у Београду
Технички факултет у Бору
Број: VI/4-8-6
Бор, 26. 03. 2026. године

На основу чл. 49. Статута Техничког факултета у Бору и чл. 35. Правилника о докторским студијама на Техничком факултету у Бору, Наставно научно веће Факултета на седници одржаној 26. 03. 2026. године, донело је

О Д Л У К У

I Прихвата се предлог о испуњености услова и научној заснованости теме докторске дисертације кандидата **Владана Неделковског**, мастер инж. технологије, студента докторских академских студија студијског програма Технолошко инжењерство.

II Одобрава се именованом израда докторске дисертације под називом: **„Механохемијска синтеза, карактеризација и фотокаталитичка примена допираних, кодопираних и хетероструктурних нанокатализатора на бази цинк-оксида“.**

III За ментора се именује др Милан Радовановић, редовни професор Универзитета у Београду - Техничког факултета у Бору.

IV Одлуку доставити надлежном Већу научне области Универзитета у Београду, ради давања сагласности на одлуку о прихватању теме и оређивању ментора.

Доставити:

- ВНО Универзитет у Београду
- именованом
- студентској служби
- архиви

ПРЕДСЕДНИК
НАСТАВНО-НАУЧНОГ ВЕЋА

декан

Проф. др Дејан Таникић

УНИВЕРЗИТЕТ У БЕОГРАДУ

Технички факултет у Бору

НАСТАВНО-НАУЧНОМ ВЕЋУ

Предмет: Извештај Комисије о научној заснованости теме докторске дисертације кандидата Владана (Владо) Неделковског, академско звање: Мастер инжењер технологије

Одлуком Наставно-научног већа Техничког факултета у Бору, бр. VI/4-6-6 од 29.01.2026. године, именовани смо за чланове Комисије за оцену научне заснованости теме за израду докторске дисертације кандидата Владана В. Неделковског, мастер инжењера технологије, под називом: „Механохемијска синтеза, карактеризација и фотокаталитичка примена допираних, кодопираних и хетероструктурних нанокатализатора на бази цинк-оксида“. Предложена тема припада научном пољу техничко-технолошких наука и научној области технолошко инжењерство, за које Технички факултет у Бору, Универзитета у Београду, има акредитоване докторске академске студије. На основу расположивог материјала, Комисија подноси следећи

ИЗВЕШТАЈ

1. Подаци о кандидату

1.1. Биографски подаци

Владан В. Неделковски рођен је 31.05.1995. године у Бору, Република Србија. Основну школу је завршио 2011. године у Бору, а средњу Техничку школу у Бору – смер Техничар за заштиту животне средине 2014. године. Основне академске студије на Техничком факултету у Бору, Универзитета у Београду, одсек Технолошко инжењерство, модул Неорганска хемијска технологија, уписао је школске 2014/2015, а завршио 2019. године одбраном завршног рада под називом: "Електрохемијско понашање хируршког челика у Рингеровом раствору са додатком триптофана и лизина", са оценом 10 и стекао звање дипломирани инжењер технологије. Просечна оцена током основних академских

студија била је 9,14. Мастер академске студије на студијском програму Технолошко инжењерство на Техничком факултету у Бору, Универзитета у Београду, уписао је школске 2019/2020 године, а завршио 2021. године одбраном мастер рада под називом: „Термохемијска синтеза и електрохемијска карактеризација ДСА електрода на бази калаја и антимона“; са оценом 10 и стекао звање мастер инжењер технологије. Просечна оцена током мастер академских студија била је 10,00. Докторске академске студије на студијском програму Технолошко инжењерство на Техничком факултету у Бору, Универзитета у Београду, уписао је школске 2021/2022 године.

У току досадашњих докторских академских студија на студијском програму Технолошко инжењерство, кандидат Владан Неделковски положио је следеће испите:

1. Одабрана поглавља хемијске термодинамике: оцена 10 (десет) - 15 ЕСПБ,
2. Наука о материјалима: оцена 10 (десет) - 15 ЕСПБ,
3. Електрохемијска технологија: оцена 10 (десет) - 15 ЕСПБ,
4. Заштита животне средине: оцена 10 (десет) - 15 ЕСПБ,
5. Интелигентни системи управљања: оцена 10 (десет) - 20 ЕСПБ,
6. Докторска дисертација - студијски истраживачки рад 1: оцена 10 (десет) - 30 ЕСПБ,
7. Докторска дисертација - студијски истраживачки рад 2: оцена 10 (десет) - 30 ЕСПБ,
8. Докторска дисертација - студијски истраживачки рад 3: оцена 10 (десет) - 5 ЕСПБ,
9. Докторска дисертација - дефинисање теме: оцена 10 (десет) - 10 ЕСПБ,

Први пут у звање сарадника у настави на Техничком факултету у Бору, Универзитета у Београду, за ужу научну област Хемија, хемијска технологија и хемијско инжењерство изабран је 01.06.2020. У оквиру наставне активности на Техничком факултету у Бору, био је ангажован на следећим предметима на студијском програму Технолошко инжењерство: Неорганска хемија (ОАС), Аналитичка хемија (ОАС), Органска хемија (ОАС), Неорганска хемија 2 (ОАС), Виша неорганска хемија (ОАС), Основи инструменталних метода (ОАС), Неорганска хемијска технологија (ОАС), Стручна пракса (ОАС), и Структура и особине неорганских материјала (МАС). Јуна 2022. похађао је обуку и положио испит за саветника за хемикалије (број лиценце SH.2022.1794, „Victoria Consulting“ д.о.о., Београд). Јуна 2023. прошао је обуку и стекао сертификат ICP-OES аналитичара на Институту Суперлаб.

1.2. Сечено научно-истраживачко искуство

Научна истраживања кандидата Владан В. Неделковског усмерена су на области наноматеријала, електрохемијских и фотокаталитичких технологија, као и примене вештачких неуронских мрежа у оптимизацији хемијско-инжењерских процеса.

Резултате истраживања презентовао је и објављивао у међународним часописима и зборницима конференција. Учесник је пројеката финансираних од стране Министарства науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије. Добитник је награде „Metals

Young Researcher Award – прва награда (2025)“ на XVI Међународној конференцији International Mineral Processing And Recycling Conference у Београду.

Кандидат је активно учествовао у неколико истраживачких и образовних програма у иностранству, кроз Erasmus+ и међународне академске размене, на универзитетима у:

- Грацу (Аустрија) – University of Technology Graz – испитивања наноматеријала на бази ZnO методама SEM/EDS/XRD (2024);
- Љубљани (Словенија) – Универзитет у Љубљани – испитивања наноматеријала (2024);
- Темишвару (Румунија) – Politehnica University of Timișoara, више мобилности (2023–2025) и БИП програм „Sustainable Materials“ (2024);
- Русији – учешће у интернационалном програму студија из области инжењерства нафте и гаса у сарадњи са више руских универзитета – Tyumen Industrial University, Tyumen State University, the Higher Engineering School, and Ural Federal University – Yekaterinburg (2024).

Владан В. Неделковски је учесник бројних научних конференција (International Conference Ecological Truth and Environmental Research- EcoTER 2022 и 2023, International October Conference on Mining and Metallurgy – IOC 2024 и 2025), догађаја посвећеним популаризацији науке: „Тимочки Научни Торнадо – ТНТ“ (2020., 2021. и 2022. године) и других активности у области хемијских и технолошких наука. Био је и технички уредник Зборника студентске секције EcoTERS 2023. Члан је Српског хемијског друштва.

Учествовао је и у реализацији пројекта финансираног од стране Министарства, науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије по уговорима:

1) број: 451-03-65/2024-03/200131; и

2) број: 451-03-137/2025-03/200131

о реализацији и финансирању научно-истраживачког рада НИО Техничког факултета у Бору (Универзитет у Београду), током 2024. и 2025. године.

Владан В. Неделковски је аутор, или коаутор радова публикованих у међународним часописима (категорије M21x1 и M22x3), затим у неколико часописа националног значаја (категорије M51x1 и M53x1), као и бројних саопштења са конференција међународног значаја (категорија M33x15). Списак референци дат је у библиографији објављених радова.

Рад у водећем међународном часопису категорије M21

1. S. Stanković, M. Radovanović, S. Đorđević, **V. Nedelkovski**, B. Markoli, S. Milić, and M. Antonijević. (2026) Sustainable Production and Characterization of ZnO–GO Nanocomposites from

Waste Zn–C Batteries for Photocatalytic Degradation of Malachite Green. **Metals** 16(1), 71. <https://doi.org/10.3390/met16010071>; (ISSN: 2075-4701, IF (2024) = 2,5, *Metallurgy & Metallurgical Engineering*)

Рад у међународном часопису категорије M22

1. V. Nedelkovski, M. Radovanović, D. Medić, S. Stanković, I. Hulka, D. Tanikić, M. Antonijević. (2025) Enhancing Wastewater Treatment Through Python ANN-Guided Optimization of Photocatalysis with Boron-Doped ZnO Synthesized via Mechanochemical Route. **Processes**, 13(7), 2240. <https://doi.org/10.3390/pr13072240>; (ISSN: 2227-9717, IF (2024) = 2,8, *Engineering, Chemical*)

2. V. Nedelkovski, M. Radovanović, M. Antonijević. (2025) Advances in Photocatalytic Degradation of Crystal Violet Using ZnO-Based Nanomaterials and Optimization Possibilities: A Review. **ChemEngineering**, 9, 120. <https://doi.org/10.3390/chemengineering9060120>; (ISSN: 2305-7084, IF (2024) = 3,4, *Engineering, Chemical*)

3. D. Medić, I. Đorđević, M. Nujkić, V. Nedelkovski, A. Papludis, S. Đorđievski, N. Gajić. (2025) Copper-Mediated Leaching of LiCoO₂ in H₃PO₄: Kinetics and Residue Transformation. **Chemistry**, 7(6), 203. <https://doi.org/10.3390/chemistry7060203>; (ISSN: 2624-8549, IF (2024) = 2,3, *Chemistry, Multidisciplinary*)

Саопштење са међународног скупа штампано у целини категорије M33

1. G. Bogdanović, D. Marilović, V. Nedelkovski, Z. Stevanović, M. Sokić (2025) Influence of oxidant concentration on the leaching of flotation tailings in acidic medium. Proceedings of the 6th Metallurgical & Materials Engineering Congress of South East Europe (MME-SEE 2025), Trebinje, Bosnia and Herzegovina. <https://doi.org/10.30544/MMESEE92>

2. V. Nedelkovski, D. Medić, A. Cvetković, S. Stanković, Ž. Tasić, M. Radovanović, S. Milić (2025) Anode Nanomaterial Recovered From Spent Batteries For Peroxide-Assisted Crystal Violet Photocatalytic Degradation. XVI International Mineral Processing and Recycling Conference, Belgrade, Serbia, 28.05.2025 – 30.05.2025, pp. 119–125. ISBN: 978-86-6305-158-4. <https://doi.org/10.5937/IMPRC25119N>

3. D. Medić, M. Nujkić, Ž. Tasić, V. Nedelkovski, S. Đorđievski, S. Alagić, S. Milić (2025) Characterization of Electrode Materials From Spent Batteries In The Process Of Recovering Valuable Metals. XVI International Mineral Processing and Recycling Conference, Belgrade, Serbia, 28.05.2025 – 30.05.2025, pp. 429–435. ISBN: 978-86-6305-158-4. <https://doi.org/10.5937/IMPRC25429M>

4. S. Stanković, V. Nedelkovski, M. Radovanović, S. Đorđievski, D. Medić, S. Milić (2025) Sustainable Production of Graphene Oxide And Zinc Oxide Nanoparticles From Spent Zn-C Batteries. XVI International Mineral Processing and Recycling Conference, Belgrade, Serbia, 28.05.2025 – 30.05.2025, pp. 537–543. ISBN: 978-86-6305-158-4. <https://doi.org/10.5937/IMPRC255375>

5. A. Cvetković, **V. Nedelkovski**, D. Medić, S. Stanković, Ž. Tasić, M. Radovanović, S. Milić (2025) Waste to Resource Transformation: Innovative Approaches to Recycling Cathode Materials From Lithium-Ion Batteries. XVI International Mineral Processing and Recycling Conference, Belgrade, Serbia, 28.05.2025 – 30.05.2025, pp. 503–509. ISBN: 978-86-6305-158-4. <https://doi.org/10.5937/IMPRC25503C>
6. A. Cvetković, M. Petrović Mihajlović, Ž. Tasić, M. Radovanović, A. Simonović, **V. Nedelkovski** (2025) Influence of Organic Compound Structure on Brass Corrosion Inhibition Efficiency. XVI International Mineral Processing and Recycling Conference, Belgrade, Serbia, 28.05.2025 – 30.05.2025, pp. 497–503. ISBN: 978-86-6305-158-4. <https://doi.org/10.5937/IMPRC25497C>
7. D. Medić, S. Milić, N. Milošević, M. Nujkić, **V. Nedelkovski**, S. Stanković (2024) Application of The Shrinking Core Model In The Leaching Process of LiNiMnCoO_2 . 31st International Conference Ecological Truth & Environmental Research – EcoTER'24, Sokobanja, Serbia, 18–21 June 2024, pp. 441. ISBN: 978-86-6305-152-2
8. S. Stanković, **V. Nedelkovski**, D. Buzdugan, I. Hulka, M. Gorgievski, S. Milić, M. Radovanović (2024) Influence of calcination temperature on the morphology, chemical composition, and structure of ZnO nanoparticles. 31st International Conference Ecological Truth & Environmental Research – EcoTER'24, Sokobanja, Serbia, 18–21 June 2024, pp. 508. ISBN: 978-86-6305-152-2
9. **V. Nedelkovski**, S. Stanković, D. Medić, D. Buzdugan, I. Hulka, S. Milić, M. Radovanović (2024) Photocatalytic Properties of C-ZnO Nanoparticles Synthesized via Mechanochemical Method. 31st International Conference Ecological Truth & Environmental Research – EcoTER'24, Sokobanja, Serbia, 18–21 June 2024, pp. 335. ISBN: 978-86-6305-152-2
10. S. Stanković, **V. Nedelkovski**, M. Radovanović, S. Milić (2023) Mechanism and Kinetics of Electrocatalytic Oxidation of Phenol. 30th International Conference Ecological Truth And Environmental Research – EcoTER'23, Stara planina, Serbia, 20.06.2023 – 23.06.2023, pp. 341–347. ISBN: 978-86-6305-137-9
11. D. Medić, I. Đorđević, M. Nujkić, A. Papludis, **V. Nedelkovski**, S. Alagić, S. Milić (2023) Use of Copper Powder as a Reducing Agent In The Leaching Process Of LiCoO_2 . XV International Mineral Processing And Recycling Conference, Belgrade, Serbia, 17.05.2023 – 19.05.2023, pp. 242–247. ISBN: 978-86-6305-133-1
12. **V. Nedelkovski**, S. Stanković, M. Radovanović, M. Antonijević (2022) Synthesis And Characterisation Of $\text{Ti/SnO}_2\text{-Sb}$ -Type DSA Anodes For Wastewater Treatment. 29th International Conference Ecological Truth And Environmental Research – EcoTER'22, Sokobanja, Serbia, 21.06.2022 – 24.06.2022, pp. 226–232. ISBN: 978-86-6305-123-2
13. M. Radovanović, A. Simonović, M. Petrović, Ž. Tasić, **V. Nedelkovski**, M. Antonijević (2021) L-Lysine As Corrosion Inhibitor Of Stainless Steel In Ringer's Solution. 52nd International October

Conference On Mining And Metallurgy, Bor, Serbia, 29.11.2021 – 30.11.2021, pp. 129–132. ISBN: 978-86-6305-119-5

14. M. Radovanović, V. Nedelkovski, A. Simonović, Ž. Tasić, M. Petrović, M. Antonijević (2019) Electrochemical Behavior Of Stainless Steel 316L In Ringer's Solution In The Presence Of L-Tryptophan. 27th International Conference Ecological Truth and Environmental Research, Bor, Borsko jezero, Serbia, 18.06.2019 – 21.06.2019, pp. 392–397. ISBN: 978-86-6305-097-6

15. V. Nedelkovski, J. Martić, M. Marković, N. Milošević, K. Ishizaka, Y. Ishiyama, D. Ishiyama, M. Radovanović (2018) Monitoring of ferrous ions content, flow rate and total iron content, comparison for 2018 and 2011. 5th International Student Conference on Technical Sciences, Bor, Serbia, p. 26. ISBN: 978-86-6305-085-3

Рад у водећем националном часопису категорије M51

1. V. Nedelkovski, M. Radovanović, S. Alagić (2024) Photocatalytic degradation of naphthalene, using various nanocomposite materials mostly based on metal oxides. *Zaštita Materijala*, 65(3), 524–533. <https://doi.org/10.62638/ZasMat1007>

Рад у националном часопису категорије M53

1. Aleksandra D. Papludis, Slađana Č. Alagić, Snežana M. Milić, Dragana V. Medić, Sonja S. Stanković, Vladan V. Nedelkovski, Aleksandar Z. Cvetković (2024) Phytomonitoring of pyrene of atmospheric origin in the rural and urban/industrial sites of Bor's municipality using leaves and stems of *Hedera helix* L., *Chemia Naissensis*, ISSN 2620-1895, 6(2), 34–41. <https://doi.org/10.46793/ChemN6.2.34P>

1.3. Оцена подобности кандидата за рад на предложеној теми докторске дисертације

На основу претходно изложених података о досадашњем раду, оствареним резултатима у току докторских академских студија и научно-истраживачког рада кандидата, Комисија сматра да Владан В. Неделковски поседује научно-стручну усмереност, способност и самосталност за научно-истраживачки рад у области којој припада предложена тема дисертације (Технолошко инжењерство). Комисија закључује, да кандидат Владан В. Неделковски поседује све потребне квалификације и испуњава све формалне услове за израду докторске дисертације под називом „Механохемијска синтеза, карактеризација и фотокаталитичка примена допираних, кодопираних и хетероструктурних нанокатализатора на бази цинк-оксида“.

2. Предмет и циљ истраживања

Предмет и циљ ове докторске дисертације, биће испитивање могућности механохемијске синтезе, карактеризације и фотокаталитичке примене допираних, кодопираних и хетероструктурних нанокатализатора на бази цинк-оксида, ради развоја

економичне, еколошки прихватљиве и ефикасне методе за третман отпадних вода контаминираних органским загађивачима, при чему је као модел-загађивач одабрана синтетичка боја кристал виолет. Осим тога, као један од предмета и циљева истраживања осмишљена је и примена вештачких неуронских мрежа (енг. Artificial Neural Networks, ANN) за оптимизацију процеса фотокаталитичке деградације, чиме би се значајно смањио обим експерименталног рада, уз истовремено повећање прецизности предвиђања оптималних експерименталних услова. У том смислу, ради добијања што ефикаснијих фотокатализатора са побољшаним оптичким и електричним својствима, уз истовремено разумевање механизма који утичу на њихову активност, у овој докторској дисертацији планирано је да се по први пут систематски испита синергистички ефекат допирања (бором, сребром и азотом), кодопирања (B/Ag и B/N) и формирања р-п хетероспојева са Cu_2O , на фотокаталитичку ефикасност цинк-оксидних наноматеријала синтетисаних механохемијским поступком.

Полутанти од интереса у овој докторској дисертацији, тј. синтетичке боје, а посебно кристал виолет, представљају групу хидрофилних катјонских једињења, често веома сложене и стабилне структуре, која се пак добро растварају у води и која последњих деценија представљају све већи проблем са аспекта угрожавања животне средине и здравља људи, иако су у отпадним водама присутна у микро-концентрацијама. Многа једињења из ове групе су чак и у овако ниским концентрацијама генотоксична, мутагена и могу изазвати појаву тумора код водених организама, као и озбиљне поремећаје код људи. Из ових разлога, неопходно је развити ефикасне методе уклањања ових супстанци пре испуштања отпадних вода у животну средину. У оквиру напредних оксидационих процеса (енг. Advanced Oxidation Processes, AOPs), хетерогена фотокатализа се издвојила као посебно атрактивна метода за разградњу синтетичких боја, јер се може спроводити у амбијенталним условима, може довести до потпуне минерализације органског угљеника под дејством сунчеве светлости, уз могућност коришћења фотокатализатора који је економичан, хемијски и механички стабилан и има могућност поновне употребе без значајног губитка активности. Цинк-оксид се међу полупроводничким фотокатализаторима истиче због високе оксидационе моћи, нетоксичности и ниске цене, чиме испуњава наведене захтеве.

Због ограничене апсорпције у видљивом делу спектра и брзе рекомбинације фотогенерисаних парова електрон-шупљина, сматра се да примена чистог цинк-оксида у фотокаталитичким процесима има значајна ограничења. С обзиром да допирање одговарајућим елементима и формирање хетероспојева представљају ефикасне стратегије за превазилажење ових недостатака, као и да механохемијска синтеза омогућава једноставну, брзу и економичну производњу наноматеријала са прецизно контролисаном стехиометријом, систематско испитивање ових приступа представља научно оправдан и актуелан предмет истраживања.

У општем случају, сва органска загађујућа једињења, па тако и кристал виолет, могу потицати из различитих индустријских грана (текстилна, фармацевтска, козметичка, прехранбена, папирна и кожарска индустрија), као и из медицинске и биолошке дијагностике. Ипак, присуство кристал виолета у животној средини генерално је препознато као контаминација која потиче из неадекватно пречишћених индустријских ефлуената. Проблеми узроковани синтетичким бојама, а посебно кристал виолетом, присутни су на глобалном нивоу. Многе локалне заједнице изложене су дугогодишњем загађењу водених екосистема обојеним ефлуентима, што доводи до инхибиције фотосинтезе, негативних еколошких ефеката, стварања непријатних мириса, стерилности и ефекта феминизације водених организама, тровања и одумирања микроорганизама услед смањеног нивоа раствореног кисеоника. Због тога управљање отпадним водама контаминираним синтетичким бојама представља тему од глобалног интереса.

Међутим, често се дешава да не постоје једноставна решења за ефективно уклањање ових загађивача из водених система. Бројне технологије базиране на различитим физичким, хемијским и биолошким процесима, биле су тестиране у циљу добијања поузданих података у односу на њихову ефективност при редукцији, или пак тоталном уклањању синтетичких боја из контаминираних вода. Изведени тестови показали су многе афирмативне, али у исто време и бројне негативне резултате за сваки поједини приступ. Ипак, током последњих деценија, хетерогена фотокатализа на бази полупроводничких наноматеријала почела је да се истиче као релативно једноставна, ефикасна и пре свега – еколошки прихватљива метода за третман отпадних вода. У случају цинк-оксидних фотокатализатора, показано је да модификација допирањем и формирањем хетероспојева може значајно да побољша фотокаталитичку ефикасност, омогућавајући примену под сунчевим зрачењем и то на један врло ефикасан и безбедан начин.

Генерално, уочене главне предности хетерогене фотокатализе у поређењу са другим приступима третмана отпадних вода су:

- а) могућност спровођења процеса у амбијенталним условима, енергија коју користи потиче првенствено од сунца (обновљив извор енергије),
- б) може довести до потпуне минерализације органских загађивача до CO_2 и H_2O и
- в) могућност вишеструке употребе катализатора уз минималне губитке активности.

Такође, уочљива је чињеница, из раније спроведених истраживања, да примена вештачких неуронских мрежа у оптимизацији фотокаталитичких процеса може да

омогући прецизније предвиђање оптималних параметара у односу на класичне кинетичке и статистичке методе. Ово је додатно довело до развоја интелигентних модела за предвиђање ефикасности деградације, који за крајњу последицу имају значајно смањење обима експерименталног рада, времена и ресурса потребних за развој и примену фотокаталитичких процеса у реалним условима.

Наиме, позната је чињеница да наноматеријали на бази цинк-оксидни поседују бројне структурне, оптичке и диелектричне карактеристике које их чине скоро идеалним фотокатализаторима за третман отпадних вода. Тако, иако је уочено да чист ZnO има ограничену апсорпцију у видљивом делу спектра и висок степен рекомбинације носилаца наелектрисања, такође је установљено да допирањем одређеним елементима (бор, сребро, азот) и формирањем р-п хетероспојева са Cu_2O могу значајно да се превазиђу ови недостаци; додатно, механохемијска синтеза омогућава производњу овако модификованих наноматеријала на брз, једноставан и економичан начин, са прецизно контролисаном стехиометријом и високим степеном поновљивости.

С обзиром на изнете чињенице, главни циљ ове докторске дисертације биће синтеза чистог ZnO , В-допираног ZnO (В- ZnO), В/Аг-кодопираног ZnO (В/Аг- ZnO), В/Н-кодопираног ZnO (В/Н- ZnO), чисте $\text{ZnO}/\text{Cu}_2\text{O}$ хетероструктуре, В/Аг- $\text{ZnO}/\text{Cu}_2\text{O}$ и В/Н- $\text{ZnO}/\text{Cu}_2\text{O}$ хетероструктура механохемијским поступком, као и њихова детаљна структурна, морфолошка и оптичка карактеризација (XRD, SEM/EDS, UV-Vis). Након тога, циљ је испитати фотокаталитичку активност синтетисаних наноматеријала у процесу деградације кристал виолета под UV-A и соларним зрачењем, уз одређивање кинетичких параметара и стабилности катализатора кроз више узастопних циклуса. При томе, утицај врсте и концентрације допаната, као и формирања хетероспојева на структуру, оптичка својства и фотокаталитичку ефикасност биће систематски испитан и упоређен, како би се издвојио најефикаснији наноматеријал за примену у третману вода првенствено контаминираних бојом кристал виолет. Поред тога, циљ је развити, тренирати и валидирати ANN модел у програмском језику Python за предвиђање оптималних експерименталних параметара (почетна концентрација боје, време озрачивања, удео допанта, температура калцинације), чиме би се значајно смањио обим експерименталног рада, уз истовремено повећање прецизности и поузданости предвиђања. Такође ће бити испитани и утицаји структурних параметара (величина кристалита, ширина забрањене зоне, концентрација дефеката) на фотокаталитичку активност синтетисаних наноматеријала. Утицај врсте синтетисаног наноматеријала на ефикасност деградације кристал виолета биће такође испитан у односу на све детектоване параметре процеса.

Као један од додатних циљева ове дисертације биће и испитивање могућности вишеструке употребе најефикаснијег синтетисаног фотокатализатора у узастопним циклусима деградације кристал виолета, јер се стабилност и могућност рециклирања

катализатора никада раније нису испитивали за овај тип механохемијски синтетисаних, допираних и хетероструктурних наноматеријала на бази ZnO.

Списак најзначајније научно-стручне литературе која ће се користити у дисертацији

Прегледом литературе, уочена је све већа заинтересованост научне и стручне јавности за проблематику употребе кодопираних и хетероструктурних цинк оксидних наноматеријала, при елиминацији загађености животне средине органским бојама, утицају њихових структурних особина на фотокаталитичке перформансе, као и оптимизацији методама машинског учења попут вештачких неуронских мрежа. Најзначајнија литература коришћена за дефинисање и обраду теме ове докторске дисертације дата је по абecedном редоследу:

Abdullah F.H., Bakar N.H.H.A., Bakar M.A. (2021) Current Advancements on the Fabrication, Modification, and Industrial Application of Zinc Oxide as Photocatalyst in the Removal of Organic and Inorganic Contaminants in Aquatic Systems. *Journal of Hazardous Materials*, 424, 127416. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2021.127416>

Abebe B., Murthy H.C.A., Amare E. (2020) Enhancing the Photocatalytic Efficiency of ZnO: Defects, Heterojunction, and Optimization. *Environmental Nanotechnology, Monitoring & Management*, 14, 100336. <https://doi.org/10.1016/j.enmm.2020.100336>

Abou Zeid S., Leprince-Wang Y. (2024) Advancements in ZnO-Based Photocatalysts for Water Treatment: A Comprehensive Review. *Crystals*, 14, 611. <https://doi.org/10.3390/cryst14070611>

Adaikalam K., Valanarasu S., Ali A.M., Sayed M.A., Yang W., Kim H.-S. (2022) Photosensing Effect of Indium-Doped ZnO Thin Films and Its Heterostructure with Silicon. *Journal of Asian Ceramic Societies*, 10, 108–119. <https://doi.org/10.1080/21870764.2021.2015847>

Aftab S., Muhammad H., Shah N.S., Shabir T., Nisar J., Shah A., Shah I. (2022) Highly Efficient Visible Light Active Doped ZnO Photocatalysts for the Treatment of Wastewater Contaminated with Dyes and Pathogens of Emerging Concern. *Nanomaterials*, 12, 486. <https://doi.org/10.3390/nano12030486>

Ahmed A.Z., Islam M.M., Islam M.M.U., Masum S.M., Islam R., Molla M.A.I. (2020) Fabrication and Characterization of B/Sn-Doped ZnO Nanoparticles via Mechanochemical Method for Photocatalytic Degradation of Rhodamine B. *Inorganic and Nano-Metal Chemistry*, 51, 1369–1378. <https://doi.org/10.1080/24701556.2020.1835976>

Aina A.R.N., Patel H., Aich S., et al. (2025) Recent Advances in ZnO Based Photocatalysts for Industrial Dye Degradation. *Discover Applied Sciences*, 7, 977. <https://doi.org/10.1007/s42452-025-07530-z>

Akter N., Rahman M.A., Zaman M., Hossain M.M. (2023) ZnO-Cu₂O Composites for Photocatalytical Removal of Methylene Blue from Aqueous Solution under Visible Light. *Dhaka University Journal of Science*, 71, 42–48. <https://doi.org/10.3329/dujs.v71i1.65271>

Alanazi H.S., Ahmad N., Alharthi F.A. (2021) Synthesis of Gd/N Co-Doped ZnO for Enhanced UV-Vis and Direct Solar-Light-Driven Photocatalytic Degradation. *RSC Advances*, 11, 10194–10202. <https://doi.org/10.1039/d0ra10698d>

Alizadeh M., Qarachal J.F., Sheidaee E. (2025) Understanding the Ecological Impacts of Nanoparticles: Risks, Monitoring, and Mitigation Strategies. *Nanotechnology for Environmental Engineering*, 10. <https://doi.org/10.1007/s41204-024-00403-7>

Aroui L., Madani S., Bousnoubra I., Boublia A., Lakikza I., Aouni S.I., Abdelouahed L., Ernst B., Alam M., Benguerba Y. (2024) Enhanced Degradation of Crystal Violet Using PANI-ZnO Nanocomposites: Electro-Oxidation and Photocatalysis Studies. *Journal of Molecular Liquids*, 412, 125818. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2024.125818>

Arya S., Mahajan P., Mahajan S., Khosla A., Datt R., Gupta V., Young S.-J., Oruganti S.K. (2021) Review—Influence of Processing Parameters to Control Morphology and Optical Properties of Sol-Gel Synthesized ZnO Nanoparticles. *ECS Journal of Solid State Science and Technology*, 10, 023002. <https://doi.org/10.1149/2162-8777/abe095>

Ashebir H., Diale P., Worku A., Babae S., Nure J.F., Msagati T.A.M. (2025) Optimization of Photocatalytic Degradation of Sulfamethoxazole from Wastewater Using Developed N-doped TiO₂/Biochar. *Results in Engineering*, 26, 105170. <https://doi.org/10.1016/j.rineng.2025.105170>

Baig A., Panchal S., Siddique M. (2025) A Review of Visible-Light-Active Zinc Oxide Photocatalysts for Environmental Application. *Catalysts*, 15, 100. <https://doi.org/10.3390/catal15020100>

Ben Ameer S., Belhadjltaief H., Duponchel B., Leroy G., Amlouk M., Guermazi H., Guermazi S. (2019) Enhanced Photocatalytic Activity against Crystal Violet Dye of Co and In Doped ZnO Thin Films Grown on PEI Flexible Substrate under UV and Sunlight Irradiations. *Heliyon*, 5, e01912. <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2019.e01912>

Berkani M., Bouhelassa M., Kadmi Y., Bouchareb M.K. (2020) Photocatalytic Degradation of Industrial Dye in Semi-Pilot Scale Prototype Solar Photoreactor: Optimization and Modeling Using ANN and RSM Based on Box–Wilson Approach. *Topics in Catalysis*, 63, 964–975. <https://doi.org/10.1007/s11244-020-01320-0>

Chandrika K.C., Prabhu T.N., Krishna R.H., Kiran R.R.S. (2021) Applications of Artificial Neural Network and Box-Behnken Design for Modelling Malachite Green Dye Degradation from Textile Effluents Using TiO₂ Photocatalyst. *Environmental Engineering Research*, 27, 200553. <https://doi.org/10.4491/eer.2020.553>

Cherif S., Yazid H., Rekhila G., Sadaoui Z., Trari M. (2021) The Optical and Photo-Electrochemical Characterization of Nano-ZnO Particles and Its Application to Degradation of Reactive Blue 19 under Solar Light. *Optik*, 238, 166751. <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2021.166751>

Constantino D.S.M., Dias M.M., Silva A.M.T., Faria J.L., Silva C.G. (2022) Intensification Strategies for Improving the Performance of Photocatalytic Processes: A Review. *Journal of Cleaner Production*, 340, 130800. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2022.130800>

De Oliveira R., Sant'Ana A.C. (2024) Crystal Violet Degradation by Visible Light-Driven AgNP/TiO₂ Hybrid Photocatalyst Tracked by SERRS Spectroscopy. *Vibrational Spectroscopy*, 133, 103694. <https://doi.org/10.1016/j.vibspec.2024.103694>

Dil E.A., Ghaedi M., Ghaedi A., Asfaram A., Jamshidi M., Purkait M.K. (2016) Application of Artificial Neural Network and Response Surface Methodology for the Removal of Crystal Violet by Zinc Oxide Nanorods Loaded on Activated Carbon: Kinetics and Equilibrium Study. *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers*, 59, 210–220. <https://doi.org/10.1016/j.jtice.2015.07.023>

Erfan N.A., Barakat N.A.M., Mahmoud M.S., Kim H.Y. (2023) Synergistic Doping with Ag, CdO, and ZnO to Overcome Electron-Hole Recombination in TiO₂ Photocatalysis for Effective Water Photo Splitting Reaction. *Frontiers in Chemistry*, 11. <https://doi.org/10.3389/fchem.2023.1301172>

Gaggero E., Calza P., Paganini M.C., Cerrato E. (2021) Cerium-, Europium- and Erbium-Modified ZnO and ZrO₂ for Photocatalytic Water Treatment Applications: A Review. *Catalysts*, 11, 1520. <https://doi.org/10.3390/catal11121520>

Ghrib T., Massoudi I., Al-Otaibi A.L., Al-Malki A., Kharma A., Al-Hashem E., Al-Ghamdi R.A., Al-Zuraie R.A. (2021) Effects of Terbium Doping on Structural, Optical and Photocatalytic Properties of ZnO Nanopowder Prepared by Solid-State Reaction. *Journal of Inorganic and Organometallic Polymers and Materials*, 31, 239–250. <https://doi.org/10.1007/s10904-020-01761-w>

He Z., Xia Y., Tang B., Jiang X., Su J. (2016) Fabrication and Photocatalytic Property of ZnO/Cu₂O Core-Shell Nanocomposites. *Materials Letters*, 184, 148–151. <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2016.08.020>

Jassi J., Sreelakshmi M., Sara Roy M. (2023) Synthesis and Characterization of Cadmium Doped Zinc Oxide Nanocomposites. *Materials Today: Proceedings*. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2023.11.070>

Khan S., Noor T., Yaqoob L., Iqbal N. (2024) Photocatalytic Dye Degradation from Textile Wastewater: A Review. *ACS Omega*, 9, 21751–21767. <https://doi.org/10.1021/acsomega.4c00887>

Lenzi G.G., Evangelista R.F., Duarte E.R., Colpini L.M.S., Fornari A.C., Menechini Neto R., Jorge L.M.M., Santos O.A.A. (2015) Photocatalytic Degradation of Textile Reactive Dye Using Artificial

Neural Network Modeling Approach. *Desalination and Water Treatment*, 57, 14132–14144. <https://doi.org/10.1080/19443994.2015.1064035>

Luo Z., Rong P., Yang Z., Zhang J., Zou X., Yu Q. (2024) Preparation and Application of Co-Doped Zinc Oxide: A Review. *Molecules*, 29, 3373. <https://doi.org/10.3390/molecules29143373>

Manimozhi R., Mathankumar M., Prakash A.P.G. (2020) Synthesis of g-C₃N₄/ZnO Heterostructure Photocatalyst for Enhanced Visible Degradation of Organic Dye. *Optik*, 229, 165548. <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2020.165548>

Mechati S., Triki Z., Toumi S., Lefnaoui S., Mazouz S., Zamouche M., Amrane A., Kebir M., Bouledjemmer I.N.E., Zhang J., Filali O., Tahraoui H. (2023) Modeling and Optimization of Hybrid Fenton and Ultrasound Process for Crystal Violet Degradation Using AI Techniques. *Water*, 15, 4274. <https://doi.org/10.3390/w15244274>

Meredyk V.A., Teobaldo G.B.M., Unger C.V., Agustini D., De Oliveira C.L.P., Barbano E.C., Ribeiro E., Yokaichiya F., Kellermann G. (2024) Structure and Optical Properties of Cu₂O Nanocrystals in a Sodium-Borate Glass. *Ceramics International*, 51, 105–116. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2024.10.379>

Mittal M., Sharma M., Pandey O.P. (2014) Photocatalytic Studies of Crystal Violet Dye Using Mn Doped and PVP Capped ZnO Nanoparticles. *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*, 14, 2725–2733. <https://doi.org/10.1166/jnn.2014.8615>

Mohamed S.K., Hegazy S.H., Abdelwahab N.A., Ramadan A.M. (2017) Coupled Adsorption-Photocatalytic Degradation of Crystal Violet under Sunlight Using Chemically Synthesized Grafted Sodium Alginate/ZnO/Graphene Oxide Composite. *International Journal of Biological Macromolecules*, 108, 1185–1198. <https://doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2017.11.028>

Mohamadpour F., Amani A.M. (2024) Photocatalytic systems: reactions, mechanism, and applications. *RSC Advances*, 14, 20609–20645. <https://doi.org/10.1039/d4ra03259d>

Moradi M., Moradkhani M.A., Hosseini S.H., Olazar M. (2022) Intelligent Modeling of Photocatalytically Reactive Yellow 84 Azo Dye Removal from Aqueous Solutions by ZnO-Light Expanded Clay Aggregate Nanoparticles. *International Journal of Environmental Science and Technology*, 20, 3009–3022. <https://doi.org/10.1007/s13762-022-04728-1>

Naik E.I., Naik H.S.B., Sarvajith M.S., Pradeepa E. (2021) Co-Precipitation Synthesis of Cobalt Doped ZnO Nanoparticles: Characterization and Their Applications for Biosensing and Antibacterial Studies. *Inorganic Chemistry Communications*, 130, 108678. <https://doi.org/10.1016/j.inoche.2021.108678>

Navada K.M., Shetty A.R., H G., Rai R., Kumar S., S C G., Aroor G. (2024) Sustainable Synthesis, Amplified Efficacy: Doped ZnO Nanostructures Driving Photocatalytic Excellence for Wastewater

Remediation—A Comprehensive Review. *Chemical Ecology*, 41, 215–251. <https://doi.org/10.1080/02757540.2024.2425284>

Nayak S., Kumar P. (2023) Review on Structure, Optical and Magnetic Properties of Cobalt Doped ZnO Nanoparticles. *Materials Today: Proceedings*. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2023.01.318>

Nemiwal M., Zhang T.C., Kumar D. (2021) Recent Progress in g-C₃N₄, TiO₂ and ZnO Based Photocatalysts for Dye Degradation: Strategies to Improve Photocatalytic Activity. *Science of the Total Environment*, 767, 144896. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2020.144896>

Nthunya L.N., Mosai A.K., López-Maldonado E.A., Bopape M., Dhibar S., Nuapia Y., Ajiboye T.O., Buledi J.A., Solangi A.R., Sherazi S.T.H., Ndungu P.N., Mahlangu O.T., Mamba B.B. (2025) Unseen Threats in Aquatic and Terrestrial Ecosystems: Nanoparticle Persistence, Transport and Toxicity in Natural Environments. *Chemosphere*, 382, 144470. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2025.144470>

Ong C.B., Ng L.Y., Mohammad A.W. (2018) A Review of ZnO Nanoparticles as Solar Photocatalysts: Synthesis, Mechanisms and Applications. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 81, 536–551. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2017.08.020>

Paiu M., Lutic D., Gavrilescu M., Favier L. (2025) Heterogeneous Photocatalysis for Advanced Water Treatment: Materials, Mechanisms, Reactor Configurations, and Emerging Applications. *Applied Sciences*, 15, 5681. <https://doi.org/10.3390/app15105681>

Patil P., Sannakki B., Mathad S., Veena E., Gandad S. (2023) A Review on Non-Metal and Metal Doped ZnO: Fundamental Properties and Applications. *Acta Periodica Technologica*, 54, 277–299. <https://doi.org/10.2298/apt2354277p>

Patil P., Veena E., Mathad S., Gandad S., Sannakki B. (2023) A Review on Non-Metal and Metal Doped ZnO: Fundamental Properties and Applications. *Acta Periodica Technologica*, 54, 277–299. <https://doi.org/10.2298/apt2354277p>

Pirsaheb M., Karimi K., Shahmoradi B., Moradi M., Vasseghian Y., Niculina Dragoi E. (2019) Photocatalyzed Degradation of Acid Orange 7 Dye under Sunlight and Ultraviolet Irradiation Using Ni-Doped ZnO Nanoparticles. *Desalination and Water Treatment*, 165, 321–332. <https://doi.org/10.5004/dwt.2019.24462>

Puneetha J., Kottam N., Rathna A. (2021) Investigation of Photocatalytic Degradation of Crystal Violet and Its Correlation with Bandgap in ZnO and ZnO/GO Nanohybrid. *Inorganic Chemistry Communications*, 125, 108460. <https://doi.org/10.1016/j.inoche.2021.108460>

Ramanathan S., Rashmitha R.M., Chuang H.-C., Kasemchainan J., Arumugam M.K., Lydia I.S., Pandiyarajan S., Poompradub S. (2024) Synergistic Photocatalytic Degradation of Crystal Violet Dye

Using Novel Medical Waste-Derived Carbon/ZnO Composite: A Study on Toxicological Assessment. *Process Safety and Environmental Protection*, 187, 145–158. <https://doi.org/10.1016/j.psep.2024.04.096>

Saadi H., Khemakhem H., Mezzane D., Sanguino P., Hadouch Y., Abdelmoula N., Benzarti Z., Mourad S. (2022) Electrical Conductivity Improvement of (Fe + Al) Co-Doped ZnO Nanoparticles for Optoelectronic Applications. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 33, 8065–8085. <https://doi.org/10.1007/s10854-022-07957-9>

Saleem S., Althubeiti K., Amami M., Rehman A., Jameel M.H., Sultana F., Nazir N., Ali A., Akhtar N., Zaman A., Mushtaq M., Butt S., Zeng J.H. (2022) Modification in Structural, Optical, Morphological, and Electrical Properties of Zinc Oxide (ZnO) Nanoparticles (NPs) by Metal (Ni, Co) Dopants for Electronic Device Applications. *Arabian Journal of Chemistry*, 15, 103518. <https://doi.org/10.1016/j.arabjc.2021.103518>

Salehi K., Daraei H., Teymouri P., Shahmoradi B., Maleki A. (2015) Cu-Doped ZnO Nanoparticle for Removal of Reactive Black 5: Application of Artificial Neural Networks and Multiple Linear Regression for Modeling and Optimization. *Desalination and Water Treatment*, 57, 22074–22080. <https://doi.org/10.1080/19443994.2015.1130658>

Senol S.D., Guler A., Boyraz C., Arda L. (2019) Preparation Structure and Magnetic Properties of Mn-Doped ZnO Nanoparticles Prepared by Hydrothermal Method. *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, 32, 2781–2786. <https://doi.org/10.1007/s10948-019-5030-7>

Shabna S., Dhas S.D.S.J., Singh C.J.C., Jeyakumar S.C., Biju C.S. (2024) An Overview of Prominent Factors Influencing the Photocatalytic Degradation of Cationic Crystal Violet Dye Employing Diverse Nanostructured Materials. *Journal of Chemical Technology and Biotechnology*, 99, 1027–1055. <https://doi.org/10.1002/jctb.7593>

Sifat M., Kim T., Pophali A., Jung H.-J., Meng Y., Schevon A., Shin E., Halada G., Olynik N., Sprouster D.J., Ramos H. (2024) Photocatalytic Degradation of Crystal Violet (CV) Dye over Metal Oxide (MO_x) Catalysts. *Catalysts*, 14, 377. <https://doi.org/10.3390/catal14060377>

Singh J., Singh R.C. (2020) Enhancement of Optical, Dielectric and Transport Properties of (Sm, V) Co-Doped ZnO System and Structure-Property Correlations. *Ceramics International*, 47, 10611–10627. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2020.12.174>

Sood S., Raina I., Gaur J., Kaushal S., Singh G., Kumar S., Kumar P., Misra M. (2025) Enhancing Optoelectronic Performance Through Rare-Earth-Doped ZnO: Insights and Applications. *Photonics*, 12, 454. <https://doi.org/10.3390/photonics12050454>

Türkyılmaz Ş.Ş., Güy N., Özacar M. (2017) Photocatalytic Efficiencies of Ni, Mn, Fe and Ag Doped ZnO Nanostructures Synthesized by Hydrothermal Method: The Synergistic/Antagonistic Effect between ZnO

and Metals. Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry, 341, 39–50. <https://doi.org/10.1016/j.jphotochem.2017.03.027>

Yelpale A.M., Bhange D.S., Dalavi D.S., Dhavale R.P., Lee J., Mane S.M., Bhosale R.R., Bhosale S.R., Vhangutte P.P., Kamble A.J., Patil V.L. (2024) Efficient Photocatalytic Degradation of Crystal Violet Dye Using Time-Dependent ZnO Nano Spindle. Materials Science and Engineering: B, 310, 117687. <https://doi.org/10.1016/j.mseb.2024.117687>

Yusuff A.S., Ishola N.B., Gbadamosi A.O., Thompson-Yusuff K.A. (2021) Pumice-Supported ZnO-Photocatalyzed Degradation of Organic Pollutant in Textile Effluent: Optimization by Response Surface Methodology, Artificial Neural Network, and Adaptive Neural-Fuzzy Inference System. Environmental Science and Pollution Research, 29, 25138–25156. <https://doi.org/10.1007/s11356-021-17496-1>

Zheng A.L.T., Andou Y., Abdullah C.A.C., Chung E.L.T. (2022) Recent Progress in Visible Light-Doped ZnO Photocatalyst for Pollution Control. International Journal of Environmental Science and Technology, 20, 5753–5772. <https://doi.org/10.1007/s13762-022-04354-x>

3. Полазне хипотезе

У овој докторској дисертацији, полази се од неколико основних хипотеза и то:

- да механохемијска синтеза представља ефикасан, економичан и еколошки прихватљив метод за добијање допираних, кодопираних и хетероструктурних нанокатализатора на бази ZnO са прецизно контролисаном стехиометријом, високим степеном поновљивости и могућношћу скалирања за индустријске потребе. За разлику од конвенционалних метода синтезе, механохемијски поступак омогућава реакције на собној температури без употребе растварача, чиме се значајно смањује енергетски отисак и количина опасног отпада, што је у складу са принципима зелене хемије и одрживог развоја;
- претпоставља се да допирање ZnO бором (B), као и кодопирање бором са сребром (B/Ag) и бором са азотом (B/N), доводи до значајног побољшања фотокаталитичке активности ZnO наноматеријала; очекује се да B допирање, као електрон-акцептор, мења електронску структуру ZnO, смањује брзину рекомбинације фото-генерисаних парова електрон-шупљина и помера апсорпцију ка видљивом делу спектра; код B/Ag-кодопираних узорака, хипотеза је да Ag, остварује локализовани површински плазмонски резонантни ефекат (LSPR), чиме додатно продубљује апсорпцију у видљивом региону; код B/N-кодопираних узорака, претпоставља се да N, као акцепторски допант, ствара плитке акцепторске нивое и дефектна стања изнад валентног појаса, што омогућава ефикасније раздвајање носилаца наелектрисања и супресију рекомбинације;
- следећа, али и главна претпоставка је да формирање ZnO/Cu₂O p–n хетероспојева, како код чистих, тако и код допираних узорака (B/Ag-ZnO/Cu₂O и B/N-ZnO/Cu₂O),

доводи до синергистичког побољшања фотокаталитичке ефикасности услед унапређеног раздвајања фото-генерисаних носилаца на граници споја два полупроводника; очекује се да Cu_2O , као полупроводник уже енергетске зоне ($E_g \approx 2,0\text{--}2,7 \text{ eV}$), у одређено уделу омогући апсорпцију у видљивом делу спектра и тиме учини синтетисане хетероструктуре примењивим под соларним зрачењем, што је од кључног значаја за практичну примену у третману вода;

- претпоставља се да је могуће развити предиктивни модел заснован на вештачким неуронским мрежама (ANN) у програмском језику Python, који ће са високом прецизношћу ($R^2 > 0,98$) предвиђати ефикасност фотокаталитичке деградације у функцији експерименталних параметара као што су: садржај допанта, температура калцинације, време фотокатализе, време мешања у мраку и концентрација загађивача; очекује се да ће ANN оптимизација омогућити значајно смањење обима експерименталног рада, времена и ресурса, уз истовремено повећање поузданости предвиђања оптималних услова у односу на класичне статистичке и кинетичке методе;
- коначно, претпоставка је да ће најефикаснији синтетисани наноматеријали показати високу стабилност и могућност вишеструке употребе без значајног губитка фотокаталитичке активности, што је предуслов за њихову практичну примену у реалним системима за третман отпадних вода; такође, претпоставља се да ће најбољи фотокатализатори постићи скоро потпуну деградацију кристал виолета ($> 99\%$) под UV-A зрачењем у року од 60-70 минута, као и високу ефикасност ($> 95\%$) под директним соларним зрачењем, чиме ће бити потврђена њихова применљивост у реалним условима.

4. Научне методе истраживања

Након детаљног проучавања научне литературе из области фотокатализе, наноматеријала, механохемијске синтезе и машинског учења, биће спроведен експериментални рад који обухвата синтезу, карактеризацију и примену синтетисаних наноматеријала, као и развој ANN модела за оптимизацију процеса. У истраживању ће бити примењене следеће научне методе:

- механохемијска синтеза наноматеријала – синтеза чистог ZnO , B-допираног ZnO (1 wt% B), B/Ag-кодопираног ZnO (1 wt% B са 1, 2 и 3 wt% Ag) и B/N-кодопираног ZnO (1 wt% B са 1, 2 и 3 wt% N) млевењем у ахатном авану на собној температури, без употребе растварача, уз накнадну калцинацију на 700°C у трајању од 3 часа; по потреби, биће синтетисане и $\text{ZnO/Cu}_2\text{O}$, B/Ag- $\text{ZnO/Cu}_2\text{O}$ и B/N- $\text{ZnO/Cu}_2\text{O}$ хетероструктуре;
- структурна и морфолошка карактеризација – применом рендгенске дифракције на праху (XRD) за идентификацију кристалне структуре, одређивање параметара решетке,

величине кристалита (Debye–Scherrer-ова једначина), микронапрезања, густине дислокација, степена дисторзије решетке, итд.; скенирајућа електронска микроскопија (SEM) за испитивање морфологије и дистрибуције честица; енергетско-дисперзиона спектроскопија (EDS) за потврду елементарног састава и успешности допирања;

- оптичка карактеризација – UV-Vis дифузно-рефлексионом спектроскопијом (DRS) за одређивање ширине забрањене зоне (Eg) применом Kubelka-Munk-ове функције и Таус-ових кривих; UV-Vis спектрофотометријом за праћење концентрације кристал виолета током фотокаталитичких експеримената на таласној дужини од $\lambda = 585 \text{ nm}$;

- испитивање фотокаталитичке активности – у статичком и динамичком режиму, под UV-A зрачењем ($\lambda = 395 \text{ nm}$; 100 W) и под директним соларним зрачењем (под реалним атмосферским условима); одређивање ефикасности разградње кристал виолета (почетне концентрације 20 mg/L) у функцији времена озрачивања, са и без претходног успостављања равнотеже адсорпције-десорпције мешањем у мраку (60 min);

- испитивање стабилности и могућности рециклирања – поновном употребом изабраних фотокатализатора у четири узастопна циклуса разградње кристал виолета, уз центрифугирање, испирање и сушење на 60°C између циклуса;

- развој ANN модела у програмском језику Python – применом библиотека Keras, TensorFlow, Pandas, Matplotlib и Scikit-learn; архитектура неуронске мреже биће дефинисана као feed-forward neural network са једним скривеним слојем; улазни параметри биће: садржај допанта (wt%), температура калцинације ($^\circ\text{C}$), време фотокатализе (min), време мешања у мраку (h) и почетна концентрација загађивача (mg/L); излазни параметар биће ефикасност деградације (%); модел ће бити трениран на 80% експерименталних података, валидиран на 10% и тестиран на 10%; перформансе модела биће процењене применом метрика: mean squared error (MSE), mean absolute error (MAE) и коефицијента детерминације (R^2).

- анализа и дискусија добијених резултата.

5. Очекивани научни допринос

- ✓ На основу чињеница и претпоставки изнетих у претходним поглављима, очекује се да ће механохемијска синтеза омогућити успешну производњу висококристалних, фазно-чистих наночестица ZnO са хексагоналном вурцитном структуром, без присуства секундарних фаза или нечистоћа, што је први неопходан услов за поуздано тумачење утицаја допирања и формирања хетероспојева на фотокаталитичка својства. Очекује се да ће XRD анализа потврдити смањење величине кристалита, повећање микронапрезања и густине дислокација код допираних узорака, чиме ће бити обезбеђен већи број активних места на површини катализатора и боља сепарација носилаца наелектрисања.

- ✓ Такође се очекује да ће кодопирање B/Ag и B/N довести до значајног померања апсорпционе ивице ка видљивом делу спектра и смањења ширине забрањене зоне у односу на чист ZnO, што ће бити потврђено DRS/Tauc анализом. Најизраженије сужење енергетског процепа очекује се код B/N-кодопираног узорка са 1 wt% N (BN1), што би омогућило ефикасну апсорпцију сунчевог зрачења и директну примену у соларно-фотокаталитичким процесима. Ово представља посебан и вредан допринос у области инжењерства материјала, јер се по први пут систематски пореде механизми деловања металног (Ag) и неметалног (N) кодопанта у фиксној B-допираној ZnO матрици, синтетисаној идентичном методом и под истим експерименталним условима.

- ✓ Очекује се да ће синтетисани наноматеријали показати изузетно високу фотокаталитичку активност у деградацији кристал виолета, при чему ће B/N-кодопирани узорци (посебно BN1) постићи скоро потпуну деградацију (> 99%) под UV-A зрачењем у року од 60 минута, са константом брзине реакције већом за више од два пута у односу на чист ZnO. Под директним соларним зрачењем, очекује се да ће BN1 и BA3 (B/Ag-кодопиран узорак са 3 wt% Ag) постићи > 95% деградације у року од 30–40 минута, чиме ће бити недвосмислено потврђена њихова практична примењивост у реалним условима и под природним извором зрачења, што је од кључног значаја за смањење оперативних трошкова и енергетских захтева.

- ✓ Посебан и највећи допринос ове дисертације огледао би се у развоју првог потпуно функционалног ANN модела у програмском језику Python, специјално дизајнираног за предвиђање фотокаталитичке ефикасности B-допираних и кодопираних ZnO наноматеријала у деградацији органских загађивача. Очекује се да ће развијени модел постићи високу предиктивну моћ ($R^2 > 0,98$) и омогућити прецизну оптимизацију експерименталних параметара без потребе за обимним и скупим експерименталним тестирањем. Овај интердисциплинарни приступ, који повезује науку о материјалима, хемијско инжењерство и вештачку интелигенцију, представља иновативан и оригиналан допринос који превазилази оквире традиционалних истраживања у области фотокатализе и отвара нове правце за развој интелигентних система за третман отпадних вода.

- ✓ Очекује се да ће синтетисани наноматеријали показати одличну стабилност и могућност рециклирања током минимум четири узастопна циклуса, уз очување > 90% почетне фотокаталитичке активности. Овај резултат би потврдио да се дефектно-инжењерована побољшања могу постићи без жртвовања структурне и оперативне стабилности, што је критичан захтев за комерцијализацију и

индустријску примену. Тиме би ова дисертација дала значајан допринос не само фундаменталном разумевању механизма деловања допираних и хетероструктурних ZnO фотокатализатора, већ и развоју скалабилних, економски исплативих и еколошки одрживих технологија за пречишћавање отпадних вода контаминираних синтетичким бојама и другим органским загађивачима.

6. План истраживања и структура рада

Истраживања и методе предузете у овој докторској дисертацији биће:

- ✓ Истраживања и методе предузете у овој докторској дисертацији биће:
- ✓ **теоријски приступ** – преглед научне литературе из области фотокатализе, напредних оксидационих процеса, механохемијске синтезе, допираних и кодопираних полупроводничких наноматеријала на бази ZnO, хетероструктура (ZnO/Cu₂O), карактеризационих техника (XRD, SEM/EDS, UV-Vis DRS), кинетике фотокаталитичке деградације органских боја са посебним фокусом на кристал виолет и примене вештачких неуронских мрежа у инжењерству и заштити животне средине;
- ✓ **практични приступ** – експериментални рад који обухвата:
- ✓ синтезу наноматеријала механохемијским поступком у ахатном авану на собној температури, без употребе растварача;
- ✓ синтезу чистог ZnO (Z700) калцинацијом прекурсора (цинк-ацетат дихидрат и оксална киселина дихидрат) на 700°C у трајању од 3 часа;
- ✓ синтеза В-допираног ZnO (1 wt% В) уз додавање ортоборне киселине (H₃BO₃) као извора бора;
- ✓ синтезу В/Ag-кодопираних ZnO наночестица (BA1, BA2, BA3) са фиксним садржајем бора (1 wt%) и варијабилним садржајем сребра (1, 2 и 3 wt%), уз додавање сребро-нитрата (AgNO₃) као извора сребра;
- ✓ синтезу В/N-кодопираних ZnO наночестица (BN1, BN2, BN3) са фиксним садржајем бора (1 wt%) и варијабилним садржајем азота (1, 2 и 3 wt%), уз додавање урее (NH₂CONH₂) као извора азота;
- ✓ синтезу ZnO/Cu₂O, В/Ag-ZnO/Cu₂O и В/N-ZnO/Cu₂O хетероструктурних наноматеријала;
- ✓ структурну и морфолошку карактеризацију синтетисаних наноматеријала:
- ✓ рендгенском дифракцијом на праху (XRD) за идентификацију кристалне структуре, одређивање параметара решетке (а, с), односа с/а, величине кристалита (D) применом Debye–Scherrer-ове једначине, микронапрезања (ε), густине дислокација (δ), степена дисторзије решетке (R), међураванског растојања (d), запремине јединичне ћелије (V), дужине Zn–O везе (L) и атомског фактора паковања (APF);

- ✓ скенирајућом електронском микроскопијом (SEM) за испитивање морфологије, облика, величине и агрегације честица;
- ✓ енергетско-дисперзионом спектроскопијом (EDS) за потврду елементарног састава и успешности допирања, као и одсуства нежељених примеса;
- ✓ оптичку карактеризацију UV-Vis дифузно-рефлексионом спектроскопијом (DRS) за одређивање ширине забрањене зоне (Eg) применом Kubelka-Munk-ове функције и Таус-ових кривих;
- ✓ UV-Vis спектрофотометријом за праћење промене концентрације кристал виолета (CV) током фотокаталитичких експеримената на таласној дужини од $\lambda = 585 \text{ nm}$;
- ✓ испитивање фотокаталитичке активности синтетисаних наноматеријала:
- ✓ у модел-систему са загађивачем кристал виолетом (CV) почетне концентрације 20 mg/L , уз додатак 100 mg фотокатализатора (или варијабилне количине);
- ✓ успостављање равнотеже адсорпције-десорпције мешањем на магнетној мешалици (300 rpm) у мраку у трајању од 60 минута;
- ✓ центрифугирање на 3000 rpm у трајању од 30 минута ради одвајања фотокатализатора;
- ✓ озрачивање под UV-A извором зрачења ($\lambda = 395 \text{ nm}$; 100 W) у варијабилним временским интервалима (првенствено од 15, 30, 45 и 60 минута);
- ✓ озрачивање под директним соларним зрачењем (у реалним атмосферским условима, UV индекс 7–8, температура $> 35^\circ\text{C}$, влажност $< 30\%$) у истим временским интервалима;
- ✓ одређивање ефикасности деградације ($\eta\%$) на основу промене апсорбанције на UV-Vis спектрофотометру;
- ✓ кинетичку анализу фотокаталитичке деградације применом модела псеудо-првог реда за одређивање константи брзине реакције (k) и коефицијената детерминације (R^2); као и конструкцијом кривих $\ln(C_0/C_t) = f(t)$ и линеарном регресионом анализом;
- ✓ испитивање стабилности и могућности пролонгиране употребе најефикаснијих фотокатализатора поновном употребом у четири узастопна циклуса деградације кристал виолета под UV-A зрачењем;
- ✓ развој ANN модела у програмском језику Python:
- ✓ прикупљање и нормализација експерименталних података (96 експерименталних сетова);
- ✓ дефинисање архитектуре неуронске мреже као feed-forward neural network са једним скривеним слојем и одговарајућом активационом функцијом;
- ✓ имплементација модела коришћењем различитих Python библиотеке попут: Keras, TensorFlow, Pandas, Matplotlib и Scikit-learn;
- ✓ подела података на тренинг, валидациони и тест сет, као и обука модела SGD оптимизатором током оптималног броја епоха, уз регуларизацију;

- ✓ евалуација перформанси модела применом метрика: mean squared error (MSE), mean absolute error (MAE) и коефицијента детерминације (R^2);
- ✓ валидација модела на независном скупу података (10 експерименталних сетова);
- ✓ визуализација резултата регресионом анализом и графичким приказима (loss curve, regression plot);
- ✓ дискусија резултата у контексту литературних података и теоријских основа;
- ✓ тумачење утицаја врсте и концентрације допаната на структурне, морфолошке, оптичке и фотокаталитичке карактеристике синтетисаних наноматеријала;
- ✓ објашњење механизма фотокаталитичке деградације и синергистичких ефеката кодопирања и формирања хетероспојева;
- ✓ поређење са референтним фотокатализаторима из литературе (чист ZnO, комерцијални TiO₂-P25, допирани TiO₂ и ZnO);
- ✓ евалуација практичне примењивости развијених фотокатализатора и ANN модела у реалним системима за третман отпадних вода.
- ✓ анализа и дискусија добијених резултата.

Према датом плану истраживања и планираним експерименталним активностима, може се очекивати следећа структура докторске дисертације:

Увод у коме се дефинише проблем загађења вода синтетичким бојама и значај фотокаталитичких метода; **Теоријски део** са литературним прегледом који обухвата основне принципе хетерогене фотокатализе, модификације ZnO наноматеријала (допирање, кодопирање, хетероспојеви), механизме и кинетику разградње кристал виолета, преглед досадашњих истраживања и изазове скалирања; **Циљ истраживања** са дефинисаним предметом, полазним хипотезама, научним методама и очекиваним доприносима; **Експериментални део са резултатима и дискусијом** подељен на сегменте синтетисаних материјала: 1) чист и монодопирани узорци цинк-оксида; 2) кодопирани узорци цинк-оксида и 3) ZnO/Cu₂O хетероструктура, а који обухватају синтезу узорака (чистог, В-допираног, В/Ag- и В/N-кодопираних ZnO наночестица и ZnO/Cu₂O хетероструктура), технике карактеризације, са приказом и тумачењем структурних и морфолошких својстава. Затим следи надовезивање на фотокаталитичке експерименте под различитим изворима зрачења, кинетичку анализу, испитивање стабилности и могућности поновне употребе, као и развој ANN модела у програмском језику Python са комплетним кодом, у сврху оптимизације и предикције експеримената, као и корелације микроструктурних параметара са фотокаталитичком активношћу и поређењем са литературним подацима; **Закључак** у коме се сумирају најважнији научни доприноси, практичне импликације и правци будућих истраживања; и на крају **Литература** и **Прилози** са комплетним експерименталним подацима.

7. Закључак и предлог

На основу анализе података датих у пријави кандидата и образложења теме, Комисија о научној заснованости теме докторске дисертације кандидата Владана (Владо) Неделковског закључује, да Владан В. Неделковски, мастер инжењер технологије, испуњава све услове за рад на предложеној теми: „Механохемијска синтеза, карактеризација и фотокаталитичка примена допираних, кодопираних и хетероструктурних нанокатализатора на бази цинк-оксида“, која припада научној области Технолошко инжењерство. На основу предмета истраживања, садржаја, циљева и очекиваног научног доприноса, Комисија такође сматра да је предложена тема научно утемељена и адекватна за израду докторске дисертације.

Комисија предлаже Наставно-научном већу Техничког факултета у Бору, Универзитета у Београду, да се кандидату Владану В. Неделковском, мастер инжењеру технологије, одобри израда докторске дисертације под називом „Механохемијска синтеза, карактеризација и фотокаталитичка примена допираних, кодопираних и хетероструктурних нанокатализатора на бази цинк-оксида“ и да се за ментора именује проф. др Милан Радовановић, редовни професор Универзитета у Београду - Техничког факултета у Бору.

У Бору, фебруар 2026. године

КОМИСИЈА:

др Ана Симоновић, ванредни професор
Универзитет у Београду - Технички факултет у Бору

др Жаклина Тасић, ванредни професор
Универзитет у Београду - Технички факултет у Бору

др Лидија Манчић, научни саветник
Институт техничких наука САНУ