

NASTAVNO-NAUČNOM VEĆU
UNIVERZITET U BEOGRADU
TEHNOLOŠKO-METALURŠKI FAKULTET

Predmet: Referat o urađenoj doktorskoj disertaciji kandidata **Danijele A. Soldatović**, dipl. inž. tehnologije.

Odlukom br. 35/151 od 11.04.2019. godine, imenovani smo za članove Komisije za pregled, ocenu i odbranu doktorske disertacije kandidata **Danijele A. Soldatović**, dipl. inž. tehnologije pod naslovom: **“Termodinamička analiza ravnotežnih, volumetrijskih i transportnih svojstava višekomponentnih sistema jonskih tečnosti i organskih rastvarača“**.

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

R E F E R A T

1. UVOD

1.1. Hronologija odobravanja i izrade disertacije

04.04.2016. kandidat **Danijela A. Soldatović**, dipl. inž. tehnologije prijavila je temu doktorske disertacije pod nazivom **“Termodinamička analiza ravnotežnih, volumetrijskih i transportnih svojstava višekomponentnih sistema jonskih tečnosti i organskih rastvarača“**.

Nastavno-naučno veće Tehnološko-metalurškog fakulteta, Univerziteta u Beogradu je dana 14.04.2016. odlukom 35/158 imenovalo Komisiju za ocenu podobnosti teme i kandidata za izradu doktorske disertacije.

26.05.2016. Na sednici Nastavno-naučnog veća Tehnološko-metalurškog fakulteta, na osnovu izveštaja komisije doneta je odluka 35/254 o prihvatanju Referata Komisije za ocenu podobnosti teme i kandidata za izradu doktorske disertacije **Danijele A. Soldatović**, dipl. inž. tehnologije, pod nazivom **“Termodinamička analiza ravnotežnih, volumetrijskih i transportnih svojstava višekomponentnih sistema jonskih tečnosti i organskih rastvarača“**. Za mentora ove doktorske disertacije imenovana je dr Mirjana Kijevčanin, redovni profesor Tehnološko-metalurškog fakulteta, Univerziteta u Beogradu.

13.6.2016. doneta je Odluka Univerziteta, 02 broj: 61206-2703/2-16, o saglasnosti na predlog teme doktorske disertacije **Danijele A. Soldatović**, dipl. inž. tehnologije, pod nazivom **“Termodinamička analiza ravnotežnih, volumetrijskih i transportnih svojstava višekomponentnih sistema jonskih tečnosti i organskih rastvarača“**.

11.04.2019. Na sednici Nastavno-naučnog veća Tehnološko-metalurškog fakulteta doneta je Odluka broj 35/151 o imenovanju članova komisije za pregled, ocenu i odbranu doktorske disertacije **Danijele A. Soldatović**, dipl. inž. tehnologije, pod nazivom **“Termodinamička analiza ravnotežnih, volumetrijskih i transportnih svojstava višekomponentnih sistema jonskih tečnosti i organskih rastvarača“**, u sastavu dr Mirjana Kijevčanin, redovni profesor Tehnološko-metalurškog fakulteta, Univerziteta u Beogradu, dr Ivona Radović, redovni profesor Tehnološko-metalurškog fakulteta, Univerziteta u Beogradu, dr Jelena Vuksanović, naučni saradnik Tehnološko-metalurškog fakulteta, Univerziteta u Beogradu, dr Zoran Višak, docent, School of Engineering and Applied Sciences, Univerzitet Aston.

1.2. Naučna oblast disertacije

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

Mentor ove doktorske disertacije je dr Mirjana Kijevčanin redovni profesor Tehnološko-metalurškog fakulteta, Univerziteta u Beogradu, koja je objavila preko 130 radova u međunarodnim naučnim časopisima.

1.3. Biografski podaci o kandidatu

Danijela A. Soldatović (rođena Samardžić), dipl. inž. tehnologije, je rođena 7.2.1979. godine u Ivanjici gde je i završila osnovnu školu i gimnaziju (opšti smer). Školske 1998/99. godine upisala je Tehnološko-metalurški fakultet u Beogradu, smer Hemijsko inženjerstvo. Na ovom smeru je diplomirala 2007. godine sa temom „Dobijanje mikro čestica metodom emulzifikacije u cilju kontrolisanog otpuštanja aroma”, sa ocenom 10, pod mentorstvom Prof. dr Branka Bugarskog. Školske 2008/2009. godine upisala je doktorske studije na studijskom programu Hemijsko inženjerstvo. Položila je sve ispite na doktorskim studijama, kao i završni ispit, sa prosečnom ocenom 9.83.

Od oktobra 2007-2011. godine bila je angažovana na Tehnološko-metalurškom fakultetu kao saradnik na istraživačkom projektu „*Interakcija imobilisanih ćelija, tkiva i biološki aktivnih molekula u bio reaktorskim sistemima*”, evidencioni broj: 142075, 2006-2010. godine, rukovodilac Prof. dr Branko Bugarski.

Od letnjeg semestra 2008/2009. godine do 2010/2011. godine bila je angažovana na izvođenju računskih vežbi iz predmeta Osnovi projektovanja. U oblasti naučnog rada autor i koautor pet radova u međunarodnim časopisima, kao i radova sa nacionalnih i međunarodnih skupova.

Od 2011. godine zaposlena je u JP „Nuklearni objekti Srbije“, kao Inženjer za kondicioniranje izvora, u Sektoru za upravljanje radioaktivnim otpadom. Od decembra 2018. godine je Rukovodilac Odeljenja za preradu radioaktivnog otpada.

2. OPIS DISERTACIJE

2.1. Sadržaj disertacije

Doktorska disertacija kandidata, **Danijele A. Soldatović**, dipl. inž. tehnologije, napisana je na 162 strana, uključuje 26 tabela, 32 slika, kao i 185 literaturnih navoda.

Doktorska disertacija sadrži 6 poglavlja: Uvod, Teorijski deo, Modelovanje termodinamičkih podataka, Eksperimentalni deo, Rezultati eksperimentalnih merenja i modelovanja ispitivanih veličina, Zaključak.

2.2. Kratak prikaz pojedinačnih poglavlja

U ovoj doktorskoj disertaciji ispitivana je potencijalna industrijska primena jonskih tečnosti, polimera i alkohola za tretman toksičnih organskih rastvarača. Eksperimentalno su određivana termodinamička svojstva čistih komponenata i njihovih smeša u širokom temperaturnom opsegu i na atmosferskom pritisku, kao i fazno ponašanje određenih smeša. Eksperimentalno su određene rastvorljivosti binarnih i pseudo-binarnih smeša, takođe su merene gustine, viskoznosti i indeksi refrakcije alternativnih rastvarača u smeši sa industrijskim zagađivačima (nikotinom, anilinom, *N,N*-dimetilanilinom, benzenom, toluenom, o-ksilenom, m-ksilenom, p-ksilenom). Odabrani alternativni rastvarači za analizu su jonske tečnosti, polimeri, alkoholi.

Eksperimentalni podaci su modelovani sledećim modelima: UNIFAC-VISCO, ASOG-VISCO, korelativnim McAllister dvoparametarski *three-body* i troparametarski *four-body* modelima, kao i NRTL i UNIQUAC modelima. Dobijeni rezultati su upoređivani sa eksperimentalnim podacima.

U prvom poglavlju disertacije, **Uvod**, definisana je važnost poznavanja ravnotežnih, volumetrijskih i transportnih osobina višekomponentnih sistema razmatranih u ovoj doktorskoj disertaciji. Objasnjeni su i definisani razlozi odabira ispitivanih alternativnih rastvarača i njihove potencijalne primene u nekim separacionim procesima. Predstavljene su osnovne karakteristike tri klase odabranih alternativnih rastvarača. Odabrane klase alternativnih rastvarača su (i) polimeri - *Polietilen glikoli* – PEG srednje molekulske mase 2050 i 35000 i *Polipropilen glikoli* - PPG srednje molekulske mase 425 i 2000; (ii) jonske tečnosti - *1-Butil-3-metilimidazolijumtriflate [bmim][OTf]* i *1-Butil-3-metilimidazolijum bis(trifluormetilsulfonil)imide*; (iii) alkoholi - 1-butanol, 2-butanol, 1,2-propandiol, i 1,3-propandiol.

Drugo poglavlje disertacije, **Teorijski deo**, definiše ravnotežne osobine tečno - tečno (LLE) i ravnotežne osobine čvrsto - tečno (SLE). Drugim poglavljem obuhvaćena su i volumetrijska i transportna svojstva čistih komponenti i njihovih smeša.

Treće poglavlje disertacije, **Modelovanje termodinamičkih podataka**, sadrži dva potpoglavlja. Prvim potpoglavljem su definisane teorijske osnove modelovanja ravnotežnih termodinamičkih podataka, NRTL i UNIQUAC model, apsolutno srednje odstupanje i srednja procentualna greška. Drugo potpoglavlje definiše teorijske osnove modelovanja dinamičke viskoznosti, *UNIFAC-VISCO*, *ASOG-VISCO*, McAllister dvoparametarski *three-body* i troparametarski *four-body* model.

U četvrtom poglavlju disertacije, **Eksperimentalni deo**, definisan je izbor sistema i pregled eksperimentalnih metoda. U prvom potpoglavljju, izbor sistema, prikazane su osnovne karakteristike korišćenih hemikalija kao što su proizvođač, čistoća i dodatne metode prečišćavanja, ukoliko su primenjene. Ovo potpoglavlje sadrži i poređenja eksperimentalnih vrednosti čistih supstanci sa literaturnim vrednostima na određenoj temperaturi. Data su srednja relativna odstupanja i ustanovljeno je da za sve supstance odstupanje od literaturnih podataka je bilo prihvatljivo. Opisana su osnovna termodinamička svojstva izabranih polimera, alkohola, jonskih tečnosti kao i polja njihove široke primene. Takođe su opisana i termodinamička svojstva toksičnih rastvarača nikotina, anilina, *N,N*-dimetilanilina, benzena, toluena, i o-, m-, p-ksilena. U drugom potpoglavljju dat je pregled sledećih eksperimentalnih metoda: *Eksperimentalna merenja ravnoteže tečno-tečno* binarnih sistema u temperaturnom opsegu, primenom vizuelne metode uz korišćenje dinamičke i titracione tehnike rastvora; *Eksperimentalna merenja ravnoteže čvrsto-tečno* metodom određivanja tačke zamućenja i primenom dinamičke tehnike; *Eksperimentalno merenje gustine* gde su korišćeni Anton Paar DMA 5000 sa U-cevi; *Eksperimentalno merenje indeksa refrakcije* na Anton Paar RXA 156 refraktometru; *Eksperimentalno merenje viskoznosti* na Stabinger viskozimetru (SVM 3000/G2); *Fourier-ova transformaciona infracrvena spektroskopija* za pojedine čiste supstance i odgovarajuće smeše izvedena je na FT-IR spektrofotometru (Bopsegumem MB-102); *Karl-Fisher titraciona metoda*, i korišćene aparature za pomenute metode.

U petom poglavlju disertacije, **Rezultati eksperimentalnih merenja i modelovanja ispitivanih veličina**, sadržana su dva potpoglavlja. Prvim potpoglavljem su dati rezultati eksperimentalnih merenja ravnotežnih podataka za termodinamičku ravnotežu tečno - tečno (LLE) i za termodinamičku ravnotežu čvrsto - tečno (SLE) i modelovanje ravnotežnih podataka. U okviru prve grupe merenja termodinamičke ravnoteže tečno - tečno, određivane su tačke zamućenja dva binarna sistema i četiri pseudo - binarna sistema. U okviru druge grupe eksperimentalno je određena ravnoteža čvrsto - tečno (SLE) dva polimera sa dva organska rastvarača. Rezultati ravnotežnih podataka za termodinamičke ravnoteže LLE i SLE brojučano su prikazani u tabelama 5.1 do 5.5 i grafički prikazani faznim dijagramima u tekstu. Ovo potpoglavlje pored eksperimentalnih rezultata sadrži i detaljnu diskusiju istih. Drugim potpoglavljem su dati rezultati eksperimentalnih merenja volumetrijskih i transportnih osobina. Svi eksperimenti su rađeni u okviru tri industrijska problema i na isti način su rezultati i diskutovani.

Prvo je razmatrano korišćenje alkohola u tretmanu nikotina u otpadnim vodenim tokovima. Eksperimentalno su određene gustina, viskoznost i indeks refrakcije u temperaturnom opsegu $T = 288.15 - 223.15$ K, i na atmosferskom pritisku. Iz eksperimentalnih podataka izračunate su dopunske molarne zapremine V^E , promene viskoznosti $\Delta\eta$ i promene indeksa refrakcije Δn_D , parcijalna molarna zapremina \bar{V}_i , dopunska parcijalna molarna zapremina \bar{V}_i^E , koeficijent izobarske ekspanzije α , i dopunski koeficijent izobarske ekspanzije α^E . Ove veličine fitovane su Redlich-Kister polinomom. Na osnovu izračunatih vrednosti analizirane su interakcije na molekulskom nivou koje se dešavaju u ispitivanim sistemima. U istu svrhu je poslužila i FT-IR spektroskopska analiza za čiste komponente i njihove binarne smeše. Rezultati su prikazani na dijagramima 5.6. do 5.12 u tekstu, a brojčane vrednosti su date u tabelama P1 - P4 u Prilogu. Drugo potpoglavlje je razmatralo i uklanjanje toksičnih hemikalija korišćenjem jonskih tečnosti. Izvršena je termodinamička analiza smeša organskih rastvarača, anilina i *N,N*-dimetilnilina, sa jonskim tečnostima. Eksperimentalno su merene gustine, indeks refrakcije i dinamička viskoznost za četiri binarna sistema. Iz eksperimentalnih podataka izračunate su dopunske molarne zapremine, vrednosti promene indeksa refrakcije i promene viskoznosti, dopunska molarna Gibsova energija aktivacije viskoznog toka. Dobijene vrednosti su fitovane Redlich-Kister polinomom. Takođe entalpija i entropija koje su sastavni deo dopunske molarne Gibsove energije aktivacije viskoznog toka su utvrđene pri istom sastavu sistema za tri potpuno mešljiva sistema, osim sistema anilin + [bmim][OTf] koji je delimično mešljiv. Rezultati su prikazani na dijagramima 5.13. do 5.16 u tekstu, a brojčane vrednosti su date u tabelama 5.8 i 5.9 u tekstu i tabelama P5 – P6 u Prilogu. Na kraju, ispitivana je primena polipropilena u tretmanu toksičnih hemikalija. U tu svrhu eksperimentalno su određene gustine, viskoznosti i indeksi refrakcije u temperaturnom opsegu $T = 288.15 - 223.15$ K, i na atmosferskom pritisku. Iz eksperimentalno dobijenih termodinamičkih veličina izračunavana je dopunska molarna zapremina V^E , promena indeksa refrakcije Δn_D , promena viskoznosti $\Delta\eta$, dopunska molarna Gibsova energija viskoznog toka ΔG^{*E} i pomenute veličine su fitovane Redlich-Kister polinomom. Iz dobijenih vrednosti ΔG^{*E} izračunate su i dopunska molarna entropija (ΔS^{*E}) i dopunska molarna entalpija (ΔH^{*E}) aktivacije viskoznog toka. Na osnovu dobijenih veličina analizirano je ponašanje izmerenih veličina u zavisnosti od sastava smeše i temperature i diskutovane su moguće interakcije među komponentama smeša. Rezultati su prikazani na dijagramima 5.17. do 5.23 u tekstu, a brojčane vrednosti su date u tabelama 5.10 i 5.12 u tekstu i tabelama P7 – P12 u Prilogu. Viskoznost je modelovana UNIFAC-VISCO, ASOG-VISCO, i McAllister dvoparametarskim *three-body* i troparametarskim *four-body* modelima.

U šestom poglavlju doktorske disertacije, **Zaključak**, dat je pregled rezultata do kojih se došlo tokom rada na disertaciji. Ukratko je navedeno koje veličine su merene i pod kojim uslovima, kao i koji su sistemi ispitivani. Na osnovu ispitivanja faznog ponašanja polietilen glikola u smeši sa industrijskim organskim rastvaračima zaključeno je da se PEG 2050 može koristiti, dok PEG 35000 pokazao kao anti - rastvarač. Ispitan je moguć tretman industrijskog zagađivača nikotina alkoholima i predstavljena je detaljna analiza interakcija u smešama. Poseban doprinos se sastoji u ispitivanju smeša toksičnih supstanci i jonskih tečnosti, kao rastvarača nove generacije sa svim svojim prednostima - niskom isparljivošću, podesivim konformacijama i raznolikosti interakcija. Pokazalo se da samo simultana analiza dopunskih termodinamičkih veličina daje objašnjenje molekulskih interakcija u smeši. Ispitana je i mogućnost korišćenja novih polimera, polipropilena, u tretmanu velikih industrijskih zagađivača i data je detaljna analiza brojnih specifičnih interakcija u smešama.

U sedmom poglavlju disertacije, **Literatura**, dat je pregled literature korišćene pri izradi disertacije.

3. OCENA DISERTACIJE

3.1. Savremenost i originalnost

Prethodni vek obeležio je rapidni razvoj industrije zajedno sa porastom broja i količine hemikalija koje su korišćene u različitim proizvodnim procesima.

Većina njih je toksična sa visokim negativnim uticajem na životnu sredinu i zdravlje čoveka. Statistika je dokazala da veliki udeo u formiranju ozona u troposferi zauzimaju upravo industrijski organski rastvarači. Stoga je 21. vek doneo sa sobom preokret ka upotrebi manje toksičnih i manje isparljivih supstanci a sve u cilju smanjenja zagađenja i smanjenja potrošnje resursa i energije.

Imajući u vidu navedenu problematiku cilj ove teze je bilo ispitivanje alternativnih rastvarača i njihove potencijalne primene u nekim separacionim procesima. Pronalaženje rastvarača velike selektivnosti doprinelo bi poboljšanju efikasnosti separacionog procesa i omogućilo takav dizajn ekološki prihvatljive separacije sa manjom količinom netoksičnog rastvarača. U disertaciji je izvršena detaljna termodinamička analiza ravnotežnih, volumetrijskih i transportnih svojstava svakog od alternativnih rastvarača pojedinačno ali i njihovih binarnih smeša sa toksičnim supstancama. Alternativni rastvarač je posmatran kao separacioni agens i kroz definisanje termodinamičkih ravnotežnih podataka njihovih smeša sa toksičnim supstancama analizirana je efikasnost ekološki prihvatljivog rastvarača. Treba naglasiti da su analizirani rastvarači polimeri, jonske tečnosti i alkoholi u pogledu dinamike i broja objavljenih radova doživeli kulminaciju u poslednjih deset godina što potvrđuje aktuelnost istraživanja i potrebu za njihovom primenom. Odabrani alternativni rastvarači su polimeri, polietilen glikol i polipropilen glikol; jonske tečnosti, *1-Butil-3-metilimidazolijumtriflate* [bmim][OTf] i *1-Butil-3-metilimidazolijum bis(trifluormetil sulfonil)imide*; alkoholi, 1-butanol, 2-butanol, 1,2-propandiol, i 1,3-propandiol. Ove supstance pokazuju veoma povoljna svojstva kao što su niska isparljivost i toksičnost. U dosadašnjem pregledu naučne i stručne literature za ove rastvarače u kombinaciji sa velikim industrijskim zagađivačima ispitivanim u ovom doktoratu ne postoje objavljeni naučni literaturni podaci. Na osnovu dosadašnjeg pregleda naučne literature, ispitivane smeše, nisu u potpunosti ili u dovoljnoj meri ispitivane u pogledu termodinamičkog faznog ponašanja i ostalih merenih termodinamičkih parametara kao što su gustina, viskoznost i indeks refrakcije. Doprinos ove doktorske disertacije je u ispitivanju termodinamičkih ravnoteža i mogućnosti pomeranja oblasti rastvorljivosti, odnosno nerastvorljivosti dodavanjem ko - rastvarača ili anti - rastvarača kod binarnih i pseudo- binarnih sistema polimera i organskih rastvarača. Poseban značaj ove doktorske disertacije je izvršena analiza mešljivosti alternativnih rastvarača sa izabranim toksičnim supstancama. Za određene smeše je ustanovljena potpuna mešljivost dok su neke ispoljile i delimičnu mešljivost. Za potpuno mešljive sisteme izvršena je detaljna termodinamička analiza smeša, merene su gustine, indeksi refrakcije i viskoznost. Pomoću određenih termodinamičkih veličina analizirane su molekulske interakcije i na osnovu dobijenih i analiziranih rezultata, dat je kompletan uvid u međumolekulske interakcije mešljivih i delimično mešljivih analiziranih smeša. Savremenost i originalnost istraživanja prikazanih u ovoj doktorskoj disertaciji potvrđeni su objavljivanjem više radova iz teze u istaknutim međunarodnim časopisima i saopštenjima na skupovima od nacionalnog i međunarodnog značaja.

3.2. Osvrt na referentnu i korišćenu literaturu

Tokom izrade doktorske disertacije kandidat je izvršio pregled naučne i stručne literature iz relevantnih naučnih oblasti vezanih za problematiku doktorske teze. Velika većina pregledane naučne literature sastojala se od naučnih radova objavljenim u vodećim međunarodnim časopisima od strane eminentnih stručnjaka iz oblasti i problematike predmetne doktorske teze.

Time je kandidat stekao potpun uvid u do sada objavljene rezultate ispitivanja termodinamičke ravnoteže čvrsto-tečno binarnih sistema, kao i ravnoteže tečno-tečno binarnih sistema, značajne za potencijalnu primenu u separacionim procesima. Nakon sticanja kompletnog uvida u dosadašnje objavljene rezultate, kandidat je izvršio odabir alternativnih rastvarača i njihovih smeša za ispitivanje faznog i termodinamičkog ponašanja takvih smeša. Verifikaciju eksperimentalnih rezultata, sadržanih u ovoj tezi, kandidat je potvrdio objavljivanjem više radova u istaknutim

međunarodnim časopisima, čime je dao svoj naučni doprinos na polju predmetne problematike i proširenju baze podataka ispitivanih rastvarača i njihovih smeša.

U ovoj doktorskoj disertaciji ukupno je navedeno 185 referenci, koje obuhvataju oblasti termodinamike i hemijskog inženjerstva.

3.3. Opis i adekvatnost primenjenih naučnih metoda

U prijavi doktorske teze postavljeni su zadaci koji su ostvareni korišćenjem eksperimentalnih metoda, metoda analize i obrade eksperimentalnih rezultata fazne ravnoteže, gustine, viskoznosti i indeksa refrakcije.

Korišćene su sledeće eksperimentalne metode pri izradi ove doktorske teze:

- Eksperimentalna merenja ravnoteže tečno - tečno binarnih i pseudo – binarnih sistema;
- Eksperimentalna merenja ravnoteže čvrsto - tečno binarnih sistema;
- Eksperimentalno merenje gustine;
- Eksperimentalno merenje indeksa refrakcije;
- Eksperimentalno merenje viskoznosti;
- Fourier-ova transformaciona infracrvena spektroskopija;
- Karl-Fisher titraciona metoda.

Merenja gustina na atmosferskom pritisku su izvršena na gustomeru sa vibrirajućom U cevi, Anton Paar DMA 5000, preciznosti 10^{-6} g·cm⁻³ i tačnosti $5 \cdot 10^{-6}$ g·cm⁻³. Viskoznosti na atmosferskom pritisku su merene Stabinger SVM 3000/G2 viskometrom, proizvođača Anton Paar, preciznosti 0.1% od merene vrednosti, dok je za merenje indeksa refrakcije na istom pritisku korišćen Anton Paar RXA-156 refraktometar, preciznosti $2 \cdot 10^{-5}$. Sastavi binarnih smeša su određivani posebnom procedurom uz merenje mase, vagom tipa Mettler AG 204, preciznosti 10^{-4} g.

Modelovanje eksperimentalnih rezultata je izvršeno primenom sledećih modela: UNIFAC-VISCO, ASOG-VISCO, i McAllister dvoparametarskim *three-body* i troparametarskim *four-body* modelima kao i NRTL i UNIQUAC modelima.

3.4. Primenljivost ostvarenih rezultata

Ostvareni rezultati prikazani u ovoj doktorskoj disertaciji imaju višestruku primenu. Primarni doprinos je na polju projektovanja procesa i opreme koji zahtevaju precizne ravnotežne, volumetrijske i transportne podatke. Ostvareni rezultati ispitivanja primenjivi su u oblasti zaštite životne sredine i u industrijskim procesima.

Zamena konvencionalnih rastvarača alternativnim i ekološki prihvatljivijim je od izuzetnog značaja za zdravlje čoveka i zaštitu životne okoline. Ispitivani alternativni rastvarači su putem eksperimenata potvrdili svoj potencijal za primenu u tretmanu zagađenih industrijskih tokova, kao smeša rastvarača.

3.5. Ocena dostignutih sposobnosti kandidata za samostalni naučni rad

Kandidat **Danijela A. Soldatović**, angažovana je u naučno-istraživačkom radu od trenutka zaposlenja na Tehnološko-metalurškom fakultetu, 2007. godine, na projektu finansiranom od strane Ministarstva prosvete, nauke i tehnološkog razvoja, kao i kroz njena dalja usavršavanja od 2011. godine u JP „Nuklearni objekti Srbije“.

U toku izrade doktorske disertacije pod nazivom **“Termodinamička analiza ravnotežnih, volumetrijskih i transportnih svojstava višekomponentnih sistema jonskih tečnosti i organskih rastvarača“**, kandidat je iskazao stručnost i samostalnost u svim fazama izrade teze, pružajući značajan naučni doprinos u naučnim oblastima koje do sada nisu bile istraživane ili koja su bila samo delimično istraživana.

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

4. OSTVARENI NAUČNI DOPRINOS

4.1. Prikaz ostvarenih naučnih doprinosa

Doktorska disertacija kandidata **Danijele A. Soldatović**, dipl. inž. tehnologije, pod nazivom **“Termodinamička analiza ravnotežnih, volumetrijskih i transportnih svojstava višekomponentnih sistema jonskih tečnosti i organskih rastvarača“**, pruža značajan naučni doprinos na polju termodinamičke ravnoteže čvrsto - tečno - tečno, kao i u polju volumetrijskih i transportnih svojstava fluida, koji uključuje sledeće:

- proširene su baze podataka termodinamičkih i transportnih svojstava: gustina, indeksa refrakcije i viskoznosti binarnih i pseudo – binarnih smeša, sa podacima izmerenim u širokom temperaturnom i koncentracionom intervalu;
- određeni su ravnotežni podaci binarnih smeša;
- karakterisani su novi netoksični rastvarači;
- definisane su međumolekulske interakcije u ispitivanim sistemima i objašnjen njihov uticaj na rastvorljivost i mešljivost, prisutnu kod delimično mešljivih sistema, kao i na ponašanje gustina, indeksa refrakcije i viskoznosti mešljivih sistema u zavisnosti od temperature i sastava smeše;
- dobijeni novi parametri za korelisanje i predviđanje osobina ovih sistema, što omogućuje uspešnu primenu NRTL i UNIQUAC modela na proračun termodinamičkih i ravnotežnih podataka, kao i UNIFAC-VISCO, ASOG-VISCO, i McAllister dvoparametarskih *three-body* i troparametarskih *four-body* modela na uspešno modelovanje dinamičke viskoznosti.

4.2. Kritička analiza rezultata istraživanja

Rezultati ove doktorske disertacije su u skladu sa postavljenim hipotezama. Eksperimentalne metode, korišćenje za dobijanje rezultata, prate savremene trendove što se može zaključiti i pregledom dostupne literature. Glavni doprinos ove doktorske disertacije je u termodinamičkoj analizi ravnotežnih, volumetrijskih i transportnih svojstava višekomponentnih sistema jonskih tečnosti i organskih rastvarača. Alternativni rastvarači polimeri, jonske tečnosti i alkoholi mogu poslužiti kao nova, ekološki prihvatljivija zamena za konvencionalne organske rastvarače u procesima separacije, u tretmanu otpadnih voda kao i u smeši sa drugim alternativnim rastvaračima koji se tako mogu koristiti za industrijske svrhe. Od posebnog značaja jeste to što su svi predloženi alternativni rastvarači danas izuzetno atraktivno rešenje za zamenu konvencionalnih rastvarača, zbog niske isparljivosti i toksičnosti.

4.3. Verifikacija naučnih doprinosa

Kandidat **Danijela A. Soldatović**, je iz doktorske disertacije objavila ili prezentovala 4 rada i to: 3 u vrhunskim međunarodnim časopisima (M21), 1 rad u međunarodnom časopisu (M23), 1 saopštenje sa skupa nacionalnog značaja štampano u celini (M63), i jedno saopštenje štampano u izvodu (M64), čime je verifikovala naučni doprinos svoje doktorske teze.

Kategorija M21:

1. **Soldatović, D. A.**; Vuksanović, J. M.; Radović, I. R.; Kijevčanin, M. L. Thermodynamic and Spectroscopic Interpretation of Molecular Interactions of Nicotine + Alcohol Binary

- Mixtures. *J. Chem. Thermodyn.* **2016**, *102*, 105–129. (IF (2016)=2.726; ISSN: 0021-9614), <https://doi.org/10.1016/J.JCT.2016.07.005>.
- Soldatović, D.**; Vuksanović, J.; Radović, I.; Višak, Z.; Kijevčanin, M. Excess Molar Volumes and Viscosity Behaviour of Binary Mixtures of Aniline/or N,N-Dimethylaniline with Imidazolium Ionic Liquids Having Triflate or Bistriflamide Anion. *J. Chem. Thermodyn.* **2017**, *109*, 137–154. (IF (2017)=2.631; ISSN: 0021-9614), <https://doi.org/10.1016/J.JCT.2017.02.007>.
 - Vuksanović, J.; **Soldatović, D.**; Radović, I.; Višak, Z.; Kijevčanin, M. Thermodynamic Characterization of Binary Mixtures of Poly(Propylene Glycol) 425 with Toluene and o-, m- and p-Xylenes. *J. Chem. Thermodyn.* **2019**, *131*, 393–403 (IF (2017)=2.631; ISSN: 0021-9614), <https://doi.org/10.1016/J.JCT.2018.11.020>.

Kategorija M23:

- Soldatović, D.**; Grozdanić, N.; Višak, Z.; Radović, I.; Kijevčanin, M. Effects of Solid Poly (Ethylene Glycols) Addition to the Solutions of Aniline or N,N-Dimethylaniline with Water: Experimental Measurements and Modeling. *J. Serbian Chem. Soc.* **2016**, *81* (7), 789–798. (IF (2016)=0.822; ISSN: 0352-5139), <https://doi.org/10.2298/JSC160317058S>.

Kategorija M63

- Soldatović, D.**; Grozdanić, N.; Vuksanović, J.; Radović, I.; Šerbanović, S.; Kijevčanin, M; *Investigation of the Solid-liquid Equilibrium of PEG 2000 and PEG 35000 with Aniline and N,N-dimethylaniline*, Rad izdat u Zborniku radova sa 51. savetovanje Srpskog hemijskog društva, str. 24-27., Niš, 2014.god.;

Kategorija M64:

- Soldatović, D.**; Vuksanović, J.; Radović, I.; Kijevčanin, M; *Termodinamička i spektroskopska analiza molekulskih interakcija binarnih smeša nikotin+1,2-propandiol i nikotin+1,3-propandiol*, Treća konferencija mladih hemičara Srbije, Beograd, 2015.god.

5. ZAKLJUČAK I PREDLOG

Na osnovu prethodno navedenog, mišljenje Komisije je da doktorska disertacija kandidata **Danijele A. Soldatović**, dipl. inž. tehnologije, pod nazivom “**Termodinamička analiza ravnotežnih, volumetrijskih i transportnih svojstava višekomponentnih sistema jonskih tečnosti i organskih rastvarača**“, predstavlja originalan naučni doprinos predmetne oblasti istraživanja. Originalnost doktorske disertacije kandidata je potvrđena objavljivanjem više radova u časopisima od međunarodnog značaja. Postavljeni predmet i ciljevi doktorske disertacije u potpunosti su ostvareni, na osnovu čega Komisija iznosi svoje mišljenje da doktorska disertacija pod nazivom “**Termodinamička analiza ravnotežnih, volumetrijskih i transportnih svojstava višekomponentnih sistema jonskih tečnosti i organskih rastvarača**“, u potpunosti ispunjava sve zahtevane kriterijume kao i da je kandidat tokom izrade disertacije pokazao samostalnost i originalnost u naučno - istraživačkom radu.

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

ČLANOVI KOMISIJE

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

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

.....
Dr Jelena Vuksanović, naučni saradnik
Univerzitet u Beogradu, Tehnološko-metalurški fakultet

.....
Dr Zoran Višak, docent,
Aston University School of Engineering and Applied Sciences,
Birmingham, UK