

УНИВЕРЗИТЕТ У БЕОГРАДУ
- Веће научних области техничких наука-

Београд
Студентски трг бр. 1

Достављамо вам:

- Образац захтева за давање сагласности на реферат о урађеној докторској дисертацији Сабине Ковач, дипл. инж. геологије.
-
- Одлуку Наставно-научног већа Рударско-геолошког факултета Универзитета у Београду о продужењу рока за израду докторске дисертације.
- Одлуку Наставно-научног већа Рударско-геолошког факултета Универзитета у Београду о прихватању извештаја Комисије за оцену и одбрану докторске дисертације.
- Реферат Комисије
- Један укорићен штампани примерак докторске дисертације
- Електронска верзија докторске дисертације

Шеф Одељења за студентска
и наставна питања

Љиљана Колоња, дипл. инж. рударства

Факултет: Рударско-геолошки

(Број захтева)

УНИВЕРЗИТЕТ У БЕОГРАДУ
Веће научних области техничких наука
(Назив већа научних области коме се захтев упућује)

(Датум)

ЗАХТЕВ

за давање сагласности на реферат о урађеној докторској дисертацији

Молимо да, сходно члану 46. ст.5. тач. 4. Статута Универзитета у Београду („Гласник Универзитета“, бр.131/06), дате сагласност на реферат о урађеној докторској дисертацији кандидата

Сабине (Здравко) Ковач, дипл. инж. геологије (бивше презиме Шутовић)
(име, име једног од родитеља и презиме)

КАНДИДАТ Сабина (Здравко) Ковач, дипл. инж. геологије
(име, име једног од родитеља и презиме)

пријавио је докторску дисертацију под називом:

„СИНТЕЗА И СТРУКТУРНА КАРАКТЕРИЗАЦИЈА МИКРОПОРОЗНИХ АРСЕНАТА И ФОСФАТА“

Научна област: Гео-науке Студијски програм: Геологија

Универзитет је дана 18.11.2013. године својим актом под бр. 02 број:61206-4650/2-13 дао сагласност на предлог теме докторске дисертације која је гласила:

„СИНТЕЗА И СТРУКТУРНА КАРАКТЕРИЗАЦИЈА МИКРОПОРОЗНИХ АРСЕНАТА И ФОСФАТА“

Комисија за оцену и одбрану докторске дисертације кандидата

Сабине (Здравко) Ковач, дипл. инж. геологије
(име, име једног од родитеља и презиме)

образована је на седници одржаној 28.04.2015. год. одлуком факултета под бр. 1/160, у саставу:

Име и презиме члана комисије	звање	научна област
1. <u>др Љиљана Карановић, ред. проф.</u>		<u>кристалографија</u>
2. <u>др Предраг Вулић, научни сарадник</u>		<u>кристалографија</u>
3. <u>др Тамара Ђорђевић, виши научни сарадник Института за минералогiju и кристалографију, Факултет за геонауке,</u>		
4. <u>географију и астрономију, Универзитет у Бечу</u>		<u>кристалографија</u>
5. _____		

Наставно-научно веће факултета прихватило је извештај Комисије за оцену и одбрану докторске дисертације на седници одржаној дана 21.05.2015.

ДЕКАН
Рударско-геолошког факултета

Прилог: 1. Извештај комисије са предлогом
2. Акт Наставно-научног већа факултета о усвајању извештаја
3. Примедбе дате у току стављања извештаја на увид јавности, уколико је таквих примедба било.

Проф. др Иван Обрадовић

Наставно-научно веће Рударско-геолошког факултета Универзитета у Београду, на својој седници одржаној 30.10.2014. године, сходно члану 92. став 4 б (Одлука о изменама и допунама Статута Универзитета у Београду број 178 од 21.03.2014. године), донело је

О Д Л У К У

Одобрава се продужење рока за израду докторске дисертације **Сабине Шутовић**, дипл. инж. геологије, под насловом „Синтеза и структурна карактеризација микропорозних арсената и фосфата“, до завршетка школске 2014/2015 године.

Д Е К А Н

проф. др Иван Обрадовић

Достављено:

- Ментору
- Именованој
- Одељењу за студентска питања

На основу члана 30. Закона о високом образовању, члана 117. Статута Рударско-геолошког факултета Универзитета у Београду и члана 27. Правилника о студирању на докторским студијама и стицању звања доктора наука, Наставно-научно веће Рударско-геолошког факултета Универзитета у Београду, на својој седници одржаној 21.05.2015. године, донело је

О Д Л У К У

1. Усваја се извештај комисије за оцену и одбрану докторске дисертације **Сабине Ковач**, дипл. инж. геологије, под насловом „Синтеза и структурна карактеризација микропорозних арсената и фосфата“, на коју није било примедба.
2. Универзитет у Београду је дана 18.11.2013. године дао сагласност на предлог теме докторске дисертације.
3. Рад из научног часописа са листе која је утврђена као релевантна за вредновање научне компетенције у одређеном научном пољу:
 - Karanović, Lj., Poleti, D., Đorđević, T., Šutović, S., Two new zincophosphates, $(\text{H}_3\text{NCH}_2\text{CH}_2\text{NH}_3)_2[\text{Zn}(\mu\text{-PO}_4)_2]$ and $(\text{NH}_4)[(\text{H}_3\text{N})\text{Zn}\{(\mu\text{-PO}_4)\text{Zn}\}_3]$: Crystal structures and relationships to similar open framework zinco - and aluminophosphates, J. Solid State Chem. (2011) 184, 2506 – 2515. IF=2.159; ISSN 0022-4596; doi:10.1016/j.jssc.2011.07.030.
4. Именована ће бранити докторску дисертацију пред комисијом у саставу: др Љиљана Карановић, ред. проф.; др Предраг Вулић, научни сарадник; др Тамара Ђорђевић, виши научни сарадник Института за минералогiju и кристалографију, Факултет за геонауке, географију и астрономију, Универзитет у Бечу.
5. Докторска дисертација из става 1. ове одлуке подобна је за одбрану након добијања сагласности од Већа научних области техничких наука.
6. О термину одбране благовремено се обавештава стручна служба ради обављања претходних активности.

Д Е К А Н

др Иван Обрадовић, ред. проф.

Достављено:

- Већу научних области техничких наука
- Комисији
- Именованој
- Одељењу за студентска питања

УНИВЕРЗИТЕТ У БЕОГРАДУ

Рударско-геолошки факултет

НАСТАВНО-НАУЧНОМ ВЕЋУ

Предмет: Реферат о урађеној докторској дисертацији кандидата Сабине Ковач, дипл. инж. геологије.

Одлуком број 1/160 од 29. 4. 2015. године, именовани смо за чланове комисије за преглед, оцену и одбрану докторске дисертације кандидата Сабине Ковач, дипл. инж. геологије под насловом

„Синтеза и структурна карактеризација микропорозних арсената и фосфата“.

После прегледа достављене Дисертације и других пратећих материјала и разговора са кандидатом, Комисија је сачинила следећи

РЕФЕРАТ

1. УВОД

1.1. Хронологија одобравања и израде дисертације

Сабина Ковач, дипл. инж. геологије, школске 2007/2008. године уписала је докторске студије на Рударско-геолошком факултету Универзитета у Београду. На докторским студијама положила је све планом и програмом предвиђене испите са просечном оценом 10.

Дана 28. 5. 2013. године Наставно-научном већу Рударско-геолошког факултета поднет је захтев за одобрење теме докторске дисертације.

Одлуком Наставно-научног већа Рударско-геолошког факултета бр. 1/182 од 21. 6. 2013. године, именована је Комисија за оцену подобности теме, кандидата и ментора предложене теме докторске дисертације.

Одлуком број 1/238 од 1. 10. 2013. године на седници Наставно-научног већа Рударско-геолошког факултета усвојен је Извештај Комисије за оцену подобности теме, кандидата и ментора предложене теме докторске дисертације „Синтеза и структурна карактеризација микропорозних арсената и фосфата“. За ментора ове докторске дисертације именована је др Љиљана Карановић, редовни професор Рударско-геолошког факултета Универзитета у Београду.

На седници Већа научних области техничких наука Универзитета у Београду дана 25. 11. 2013. године одлуком број 1/130 од 18. 11. 2013. дата је сагласност на предлог теме докторске дисертације Сабине Ковач, дипл. инж. геологије, под насловом „Синтеза и структурна карактеризација микропорозних арсената и фосфата“.

Одлуком Наставно-научног већа Рударско-геолошког факултета бр. 1/306, од 4. 11. 2014. године, донетој на седници одржаној 30. 10. 2014. године, кандидату је одобрено продужење рока за израду докторске дисертације на годину дана због породилског одсуства.

Наставно-научно веће Рударско-геолошког факултета на седници одржаној 28. 4. 2015 године, одлуком број 1/160 од 29.4.2015. године, именовало је Комисију за оцену и одбрану докторске дисертације.

1.2. Научна област дисертације

Докторска дисертација „Синтеза и структурна карактеризација микропорозних арсената и фосфата“ припада научној области „Геонауке“, односно ужој научној области „Кристалографија“, за коју је матичан Рударско-геолошки факултет Универзитета у Београду. За ментора ове докторске дисертације именована је др Љиљана Карановић, редовни професор Рударско-геолошког факултета Универзитета у Београду.

1.3. Биографски подаци о кандидату

Сабина Ковач рођена је 13. јануара 1982. године, у Копривници, Република Хрватска. Основну школу и гимназију завршила је у Сомбору. Рударско-геолошки факултет, Универзитета у Београду уписала је 2000. године, а дипломирала је 2006. године на Геолошком одсеку, Смер за минералогiju и кристалографију, са темом „Кристалне структуре два нова арсената, $\text{Sr}_5(\text{AsO}_4)_3\text{F}$ и $\text{Ba}_{4,30}[\text{AsO}_{3,53}(\text{OH})_{0,47}]\text{Cl}$, добијена хидротермалном синтезом“, под менторством др Љиљане Карановић, редовног професора на Катедри за кристалографију. Школске 2007/2008. године уписала је докторске студије на Рударско-геолошком факултету. На докторским студијама положила је све планом и програмом предвиђене испите са просечном оценом 10.

Од 1. 9. 2008. године запослена је као истраживач-приправник на Катедри за кристалографију Рударско-геолошког факултета где је до 31. 12. 2010. године била ангажована на пројекту основних истраживања из области хемије „Структурна и функционална хемија неких прелазних и постпрелазних елемената“. Од 1. 1. 2011. године ангажована је на пројекту „0-3Д наноструктуре за примену у електроници и обновљивим изворима енергије: синтеза, карактеризација и процесирање“ (ИИИ 45007) тј. потпројекту „Структурни аспекти нано и других савремених материјала“. Такође, учесник је на међународном пројекту под називом „*Structural Chemistry of Environmentally Relevant Arsenic Compounds: Theory and Experiment*“, (V2O3-N19) („Структурна хемија једињења арсена важних за животну средину: теорија и експеримент“) финансираном од стране Аустријског истраживачког фонда (FWF), који обухвата истраживања арсената и арсенита у циљу заштите животне средине.

Звање истраживач-сарадник стекла је 2011, а реизабрана је 2015. године.

Научно-истраживачки рад Сабине Ковач односи се на синтезу и рендгенску структурну анализу, како минерала, тако и једињења добијених поступком хидротермалне синтезе. Из досадашњег научно-истраживачког рада Сабине Ковач проистекло је пет (5) радова у часописима међународног значаја (један рад из категорије М22 и четири из категорије М23) и девет (9) саопштења са међународних и националних скупова (два из категорије М34 и седам из категорије

M64). Акцент истраживања био је на нискотемпературној хидротермалној синтези и карактеризацији порозних арсената и фосфата. За детаљну карактеризацију добијених монокристала, са кристалографског аспекта, коришћена је рендгенска структурна анализа, а за испитивање других својстава синтетисаних монокристала коришћена је SEM-EDX семиквантитативна хемијска анализа, као и спектроскопске методе (Фуријеова трансформациона инфрацрвена и раманска спектроскопија). Резултати показују да се углавном ради о порозним структурама које се широко користе као катализатори, апсорбери, јонски измењивачи, итд.

Члан је Српског кристалографског друштва.

2. ОПИС ДИСЕРТАЦИЈЕ

2.1. Садржај дисертације

Дисертација је написана на 159 страна. Састоји се од предговора, резимеа на српском и енглеском језику, списка скраћеница, 6 поглавља (Увод, Теоријски део, Експериментални део, Резултати и дискусија, Закључак и Литература), једног прилога, списка табела, списка слика, биографије кандидата, списка објављених научних радова и саопштења који су резултат рада на докторској дисертацији, изјаве о ауторству, изјаве о истоветности штампане и електронске верзије докторског рада и изјаве о коришћењу. По форми и садржају написана дисертација задовољава све стандарде Универзитета у Београду за докторску дисертацију.

Текст дисертације илустрован је са 47 слика и дијаграма и садржи 57 табела. У попису коришћене литературе кандидат је навео 172 наслова.

2.2. Кратак приказ појединачних поглавља

Садржаји појединачних поглавља су следећи:

- У првом, уводном поглављу, наведени су предмет и циљ истраживања као и полазне хипотезе. Укратко су описана савремена интересовања за порозне материјале од којих су најпознатији зеолити чија се структура састоји од

тродимензионалне (3Д) полиедарске, најчешће тетраедарске, мреже и различитих ванмрежних јона и молекула који се уграђују у поре. Наведен је значај проучавања порозних материјала као и њихове могуће примене. Наглашено је да су у овом раду углавном испитивани микропорозни цинкоарсенати и цинкофосфати, који су од посебног значаја због познате могућности да се користе као адсорбенти, катализатори и јонски измењивачи.

- Теоријски део дисертације састоји се од пет поглавља. У прва два поглавља приказане су хемијске, геохемијске и минералашке карактеристике арсена и фосфора с обзиром да су предмет проучавања у оквиру ове докторске дисертације. У трећем поглављу теоријског дела дат је преглед основних својстава микропорозних структура и дефинисање разлика међу њима на основу карактеристика 3Д мреже, величине и облика пора као и катјона смештених у порима. У склопу овог поглавља описан је тополошки приказ структура и начин одређивања отворености микропорозних структура на основу густине тетраедарски координисаних атома у 3Д мрежи. У четвртом поглављу дат је приказ методе хидротермалне синтезе са посебним освртом на органски темплат, етилендиамин [en , $\text{C}_2\text{H}_4(\text{NH}_2)_2$], коришћен у овом раду. Описане су хидротермалне синтезе микропорозних материјала као и параметри и услови који утичу на комплексност ових синтеза. У петом поглављу приказане су све коришћене методе анализе и коришћена инструментација: оптичка микроскопија, рендгенска дифракција на монокристалу и структурна анализа, рендгенска дифракција на поликристалном узорку и квалитативна анализа, скенирајућа електронска микроскопија, раманска спектроскопија, Фуријеова трансформациона инфрацрвена спектроскопија (FTIR).

- У Експерименталном делу дисертације описани су услови под којима су коришћене методе синтезе и анализе. Посебно су описане процедуре за утачњавање структура кристала методом најмањих квадрата због присуства позиционе и субституционе неуређености као и ближњења. Осим тога, детаљно је описано одређивање водоничних веза, израчунавање валенце везе, дефинисање веза супергрупа-субгрупа, конструисање Бернигхаузеновог стабла, одређивање сличности структура и степена дисторзије јединичне ћелије.

- Део Резултати и дискусија састоји се од пет поглавља. У првом поглављу приказани су резултати хидротермалних синтеза урађених у току израде дисертације. Од укупно 225 урађених синтеза, у 25 добијени су монокристали. Од 25 синтетисаних монокристала, само 8 су била нова једињења чије структуре су одређене и описане. У другом поглављу приказани су резултати испитивања четири једињења који имају микропорозну структуру и познату DFT-топологију: $(\text{H}_2\text{en})[\text{ZnAsO}_4]_2$, $(\text{H}_2\text{en})[\text{Co}_{0,1}\text{Zn}_{0,9}\text{AsO}_4]_2$, $(\text{H}_2\text{en})_{0,9}(\text{en})_{0,1}[\text{Fe}_{0,1}\text{Zn}_{0,9}\text{AsO}_4]_2$ и $(\text{H}_2\text{en})[\text{ZnPO}_4]_2$. Резултати за ова 4 једињења укључују рендгенску структурну анализу, скенирајућу електронску микроскопију, раманску спектроскопију, Фуријеову трансформациону инфрацрвену спектроскопију, анализу водоничних веза и валенце везе. Посебно су за свих 18 познатих структура DFT-типа приказане везе супергрупа-субгрупа и с тим у вези конструисано је Бернигхаузенoво стабло и израчунати параметри који дефинишу сличност структура и степен дисторзије јединичне ћелије. У трећем поглављу описана су два нова цинкофосфата, $(\text{H}_2\text{en})_2[\text{Zn}(\text{PO}_4)_2]$ и $(\text{NH}_4)[(\text{NH}_3)\text{Zn}\{(\text{PO}_4)\text{Zn}\}_3]$, који такође имају микропорозне структуре. Осим описа структура ова два једињења, од којих $(\text{NH}_4)[(\text{NH}_3)\text{Zn}\{(\text{PO}_4)\text{Zn}\}_3]$ представља нови структурни тип, дати су резултати рендгенске дифракције на поликристалном материјалу и раманске спектроскопије. Посебно су описани резултати анализе водоничних веза и валенце везе, као и резултати израчунавања обртног угла тетраедарског ланца за $(\text{H}_2\text{en})_2[\text{Zn}(\text{PO}_4)_2]$ и фосфате са истим односом $T:P$ (T је катјон у тетраедарском окружењу) од 1:2. У оквиру овог поглавља израчуната је отвореност тродимензионалне мреже за $(\text{NH}_4)[(\text{NH}_3)\text{Zn}\{(\text{PO}_4)\text{Zn}\}_3]$ и остале цинкофосфате истог односа $\text{Zn}:P$ од 4:3, али различитих топологија. Дат је и тополошки приказ ових структура. У четвртм поглављу на 11 страница описана је супституциона и позициона неуређеност стронцијума и бабра у једињењу $\text{Sr}_{2,88}\text{Cu}_{3,12}(\text{PO}_4)_4$, где су осим резултата рендгенске структурне анализе приказани и резултати скенирајуће електронске микроскопије и рендгенске дифракције на поликристалном материјалу. У петом поглављу дата је на 10 страница детаљна структурна анализа и посебно анализа водоничних веза у структури $\text{Sr}_2[\text{Cu}(\text{OH})_6]$ и структурама једињења сличног хемијског састава.

- У петом поглављу дати су закључци. Сумирани су најзначајнији резултати проистекли из ове дисертације. Закључено је да се метода хидротермалне синтезе показала погодном за добијање монокристала у испитиваном систему $T1_2O/T1O-T2O/T2_2O_3 -X_2O_5-(H_2O)-Y$, где је $T1$ двовалентни или једновалентни (Ba^{2+} , Ca^{2+} , Sr^{2+} , Zn^{2+} , K^+), $T2$ двовалентни или тровалентни (Cu^{2+} , Co^{2+} , Co^{3+} , Fe^{2+} , Fe^{3+} , Mn^{2+} , Mg^{2+} , Ni^{2+} , Zn^{2+}), X петовалентни (As^{5+} , P^{5+}) катјон, а Y је ванмрежни катјон $H_2(C_2H_8N_2)^{2+}$ или NH_4^+ . На основу резултата осам описаних једињења у дисертацији може се закључити да:

- једињење $(NH_4)[(NH_3)Zn\{(PO_4)Zn\}_3]$ има нови тип структуре;
- преосталих седам једињења има познати тип структуре, али сваки од њих има неке нове, специфичне карактеристике као што је хемијски састав, неуређеност у структури или мрежа водоничних веза;
- шест испитиваних једињења има порозну, а два слојевиту структуру;
- у порама четири једињења смештени су мали органски катјони H_2en^{2+} [en = етилендиамин, $C_2H_4(NH_2)_2$], у једном се осим катјона H_2en^{2+} налазе и молекули en , док су у шестој порозној структури уграђени катјони NH_4^+ .

- У шестом поглављу дат је списак коришћене литературе који се састоји од 172 библиографске јединице.

- У Прилогу 1 дати су комплетни улазни и излазни подаци за израчунавање параметара и дефинисање сличности структура и степена дисторзије јединичне ћелије.

3. ОЦЕНА ДИСЕРТАЦИЈЕ

3.1. Савременост и оригиналност

У овој докторској дисертацији испитивани су параметри модификовања услова синтезе порозних арсената и фосфата као и њихове структуре. У данашње време истакнуто место у испитивању порозних и слојевитих структура заузимају структурне особине, јер од њих зависе физичка и хемијска својства. Ова једињења

су актуелна и занимљива првенствено са научног становишта, али и са становишта практичне примене нарочито у заштити животне средине. За карактеризацију синтетисаних једињења коришћене су савремене кристалографске, микроскопске и спектроскопске методе испитивања. Допринос ове докторске дисертације огледа се у фундаменталним сазнањима у области микропорозних арсената и фосфата који садрже различите катјоне Fe, Co, Cu, Zn, Sr и Ba, затим воду, ОН-групе, амонијак, амонијум-јоне и органске аminer. Осим тога, у овој дисертацији, описан је нов структурни тип једињења $(\text{NH}_4)[(\text{NH}_3)\text{Zn}\{(\text{PO}_4)\text{Zn}\}_3]$.

3.2. Осврт на референтну и коришћену литературу

У току израде дисертације детаљно је прегледана литература што је резултирало списком од 172 наведене научне публикације. Коришћена референтна литература махом је савремена, објављена у реномираним међународним часописима. Из списка коришћене литературе и радова које је кандидат објавио као део истраживања ове докторске дисертације, може се закључити да добро познаје и да у потпуности прати савремене светске токове у областима истраживања, које су биле предмет дисертације.

3.3. Опис и адекватност примењених научних метода

Примењене научне методе су адекватне постављеном проблему. Хидротермална синтеза је ефикасна метода за добијање монокристала микропорозних материјала. Квалитет монокристала провераван је помоћу оптичког микроскопа или бинокуларне лупе, а добијени кристали анализирани су методом рендгенске дифракције на монокристалу. За морфолошку и хемијску карактеризацију коришћена је метода скенирајуће електронске микроскопије (SEM) допуњене енергетско-дисперзивним системом (EDS). Методе FTIR и раманске спектроскопије коришћене су за одређивање садржаја $\text{H}_2\text{O}/\text{OH}/\text{NH}_4/\text{NH}_3$. За проверу фазног састава спрашеног дела синтетисаних узорака коришћена је рендгенска дифракциона анализа поликристалног материјала. Све коришћене

методе дале су јасну слику хемијског састава и кристалних структура синтетисаних једињења.

3.4. Применљивост остварених резултата

Резултати ове докторске дисертације су актуелни и занимљиви првенствено са научног становишта као фундаментална сазнања у области арсената и фосфата, али и са становишта практичне примене нарочито у заштити животне средине. Добијени структурни подаци омогућавају успостављање везе између синтезе, структуре и особина ових једињења. У данашње време структурне особине заузимају централно место у испитивању многих савремених материјала, стога ова испитивања помажу да се одреди које се топологије и везе формирају под одређеним експерименталним условима (температура, рН, величина и наелектрисање уграђених јона и молекула, итд.). Нови синтетички арсенати и фосфати могу бити интересантни и за практичну примену. Као и све порозне и слојевите структуре они имају особину да приме различите јоне и молекуле у поре или међуслојни простор. Флексибилност таквих структура омогућава њихову употребу као катализатора, апсорбената, пигмената, складишта нуклеарног и хемијског отпада, јонских измењивача, чврстих електролита, итд. Потенцијална примена испитиваних арсената и фосфата базира се на физичким и хемијским особинама, које директно зависе од кристалне структуре.

Део резултата већ је публикован у међународним часописима са SCI листе или саопштен на међународним и домаћим научним скуповима. Стога се може закључити да је остварен значајан допринос у области истраживања везаних за синтезу и структуру порозних арсената и фосфата, која су према досадашњим литературним изворима, била недовољно истражена. Добијени резултати верификовани су објављивањем радова у часописима међународног значаја, као и презентацијама на националним и међународним конференцијама.

3.5. Оцена достигнутих способности кандидата за самостални научни рад

Кандидат је током израде дисертације у потпуности овладао методологијом научно-истраживачког рада, испољио самосталност и стручност у претраживању савремене литературе, припреми и реализацији експеримената, карактеризације материјала и анализе добијених резултата. Способан је за самостални научни рад што је показао реализацијом планираног истраживања од почетне идеје до завршетка докторске дисертације, као и објављивањем низа научних радова у часописима и учешћем на научним конференцијама.

4. ОСТВАРЕНИ НАУЧНИ ДОПРИНОС

4.1. Приказ остварених научних доприноса

Дисертација представља значајан научни допринос кристалографији и кристалохемији арсената и фосфата. Синтетисано је 8 нових једињења која су испитана савременим методама. Остварени научни доприноси су релевантни за даља научна истраживања синтезе и карактеризације порозних арсената и фосфата.

Специфични остварени научни доприноси у оквиру докторске дисертације су:

1. Истакнут је значај модификовања услова синтезе и његов утицај на формирање монокристала у испитиваном систему.

2. Дат је допринос проучавању структурног модела једињења са DFT-типом структуре. Интересантно је да се у оквиру тог структурног типа јављају кристали који су различитог хемијског састава и који кристалишу у различитим просторним групама.

- Синтетисана једињења $(\text{H}_2\text{en})[\text{Co}_{0,1}\text{Zn}_{0,9}\text{AsO}_4]_2$ и $(\text{H}_2\text{en})_{0,9}(\text{en})_{0,1}[\text{Fe}_{0,1}\text{Zn}_{0,9}\text{AsO}_4]_2$ имају нов хемијски састав.

- Кристали $(\text{H}_2\text{en})[\text{ZnAsO}_4]_2$, $(\text{H}_2\text{en})[\text{Co}_{0,1}\text{Zn}_{0,9}\text{AsO}_4]_2$ и $(\text{H}_2\text{en})_{0,9}(\text{en})_{0,1}[\text{Fe}_{0,1}\text{Zn}_{0,9}\text{AsO}_4]_2$ су ближњени и кристалишу тетрагонално у просторној групи $P4_2/n$, док се $(\text{H}_2\text{en})[\text{ZnPO}_4]_2$ карактерише ромбичном просторном

групом *Rcca*, која до сад није била позната међу једињењима са DFT-топологијом мреже.

- Све четири структуре DFT-типа у каналима имају катјоне H_2en^{2+} , а само у $(\text{H}_2\text{en})_{0,9}(\text{en})_{0,1}[\text{Fe}_{0,1}\text{Zn}_{0,9}\text{AsO}_4]_2$ и молекуле етилендиаминa, en.

- У $(\text{H}_2\text{en})[\text{ZnPO}_4]_2$ један од два кристалографски различита катјона H_2en^{2+} је уређен, а други је неуређен, слично структурама у просторној групи $P4_2/n$, тј. неуређеност је узрокована симетријом просторне групе.

- У овом раду, први пут су израчунати и утачњени положаји атома водоника у структури $(\text{H}_2\text{en})[\text{ZnAsO}_4]_2$.

3. Синтетисана су и описана два цинкофосфата, ново неорганско-органско хибридно једињење, $(\text{H}_2\text{en})_2[\text{Zn}(\text{PO}_4)_2]$, и једињење са новим типом структуре, $(\text{NH}_4)[(\text{NH}_3)\text{Zn}\{(\text{PO}_4)\text{Zn}\}_3]$.

- Синтетисано хибридно једињење, $(\text{H}_2\text{en})_2[\text{Zn}(\text{PO}_4)_2]$ има нов хемијски састав што модификује неуређеност у структури.

- Карактеристике новог типа структуре коју има једињење $(\text{NH}_4)[(\text{NH}_3)\text{Zn}\{(\text{PO}_4)\text{Zn}\}_3]$ јесу отворена 3Д тетраедарска мрежа, присуство ванмрежних катјона NH_4^+ у каналима и тетраедри $\text{ZnO}_3(\text{NH}_3)$ са координисаним молекулом NH_3 на једном рогљу. Утврђено је да је $(\text{NH}_4)[(\text{NH}_3)\text{Zn}\{(\text{PO}_4)\text{Zn}\}_3]$ први 3Д цинкофосфат који садржи и координисани молекул NH_3 и у пораме смештене катјоне NH_4^+ .

4. Посебна карактеристика једињења $\text{Sr}_{2,88}\text{Cu}_{3,12}(\text{PO}_4)_4$ јесте нарушен однос Sr:Cu тј. однос није 1, већ се јавља вишак бакра у односу на стронцијум, што проузрокује две врсте неуређености у структури: супституциону и позициону.

5. У овом раду, први пут су израчунати и утачњени положаји атома водоника за $\text{Sr}_2[\text{Cu}(\text{OH})_6]$, што је омогућило детаљан преглед мреже водоничних веза и приказ сличности и разлика у мрежама водоничних веза хексахидроксида различитих метала.

4.2. Критичка анализа резултата истраживања

На основу прегледа литературе, осврта на научна истраживања из области докторске дисертације и постављених циљева истраживања, може се констатовати да су израдом докторске дисертације остварени резултати високог квалитета. Имајући у виду комплексност предмета истраживања, кандидат је приступио примени више различитих савремених метода, које се тренутно највише користе при изучавању оваквих материјала. Упоређивањем остварених резултата истраживања са раније публикованим подацима, може се закључити да добијени резултати представљају напредовање у овој области и да су унапређена постојећа знања из области синтезе монокристала и познавања структура порозних арсената и фосфата. У циљу даљег унапређивања пожељна су опсежнија истраживања, која превазилазе предмет и циљ ове докторске дисертације.

4.3. Верификација научних доприноса

До сада су објављена 3 рада у међународним часописима, а саопштено је 5 радова на конференцијама (4 рада на домаћим и 1 на међународној) који чине део докторске дисертације.

M22 – Радови објављени у истакнутом међународном часопису

1. Karanović, Lj., Poleti, D., Đorđević, T., **Šutović, S.**, Two new zincophosphates, $(\text{H}_3\text{NCH}_2\text{CH}_2\text{NH}_3)_2[\text{Zn}(\mu\text{-PO}_4)_2]$ and $(\text{NH}_4)[(\text{H}_3\text{N})\text{Zn}\{(\mu\text{-PO}_4)\text{Zn}\}_3]$: Crystal structures and relationships to similar open framework zinco- and aluminophosphates, *J. Solid State Chem.* (2011) **184**, 2506 – 2515. IF=2.159; ISSN 0022-4596; doi:10.1016/j.jssc.2011.07.030

M23 – Радови објављени у међународном часопису

1. **Šutović, S.**, Karanović, Lj., Poleti, D., Reinvestigation of $\text{Sr}_2[\text{Cu}(\text{OH})_6]$, *Acta Cryst.* (2009) **C65**, i48 – i51.
IF=0.782; ISSN 0108-2701; doi: 10.1107/S0108270109021519

2. Karanović, Lj., Šutović, S., Poleti, D., Đorđević, T., Pačevski, A., Substitutional and positional disorder in $\text{Sr}_{2.88}\text{Cu}_{3.12}(\text{PO}_4)_4$, *Acta Cryst.* (2010) **C66**, i42 – i44.
IF=0.745; ISSN 0108-2701; doi: 10.1107/S0108270110007146

M34 – Саопштења са међународног скупа штампана у изводу

1. Đorđević, T., Karanović, Lj., Šutović, S., Poleti, D., Four novel organo-templated microporous compounds with DFT: type topology, *22nd Annual Conference of the German Crystallographic Society (DGK)*, Berlin, 17 – 20 March 2014. (125).

M64 – Саопштења са скупа националног значаја штампана у изводу

1. Šutović, S., Karanović, Lj., Poleti, D., A new inorganic-organic hybrid compound, bis(ethylenediammonium) catena-bis(phosphato(V)) zincate, $(\text{H}_3\text{NCH}_2\text{CH}_2\text{NH}_3)_2[\text{Zn}(\text{PO}_4)_2]$, *XVI konferencija SKD*, Divčibare, 1 – 3. oktobar 2009. (Izvodi radova, str. 10 – 11).
2. Šutović, S., Karanović, Lj., Poleti, D., Đorđević, T., Substitutional and positional disorder in $\text{Sr}_{2.87}\text{Cu}_{3.13}(\text{PO}_4)_4$, *XVI konferencija SKD*, Divčibare, 1 – 3. oktobar 2009. (Izvodi radova, str. 34 – 35).
3. Šutović, S., Karanović, Lj., Poleti, D., Đorđević, T., Hydrothermal synthesis and crystal structure of microporous $(\text{H}_3\text{NCH}_2\text{CH}_2\text{NH}_3)(\text{ZnPO}_4)_2$, *XVIII konferencija SKD*, Andrevlje, 2 – 4. jun 2011. (Izvodi radova, str 58 – 59), poster – nagrada za najbolji poster XVIII konferencije SKD.
4. Dabić, P., Kovač, S., Karanović, Lj., Poleti, D., Đorđević, T., Synthesis, structural features and FTIR spectra of $(\text{C}_2\text{H}_{10}\text{N}_2)(\text{Co}_{0.1}\text{Zn}_{0.9}\text{AsO}_4)_2$ and $\text{H}_{1.8}(\text{C}_2\text{H}_8\text{N}_2)(\text{Fe}_{0.1}\text{Zn}_{0.9}\text{AsO}_4)_2$, *XXI konferencija SKD*, Užice, 12. – 14. 6. 2014. (Izvodi radova, str. 26 – 27).

5. ЗАКЉУЧАК И ПРЕДЛОГ

На основу прегледа докторске дисертације под називом „Синтеза и структурна карактеризација микропорозних арсената и фосфата“ кандидата Сабине Ковач, дипл. инж. геологије, Комисија констатује да је урађена докторска дисертација написана према свим стандардима у научноистраживачком раду, као и да испуњава

све услове предвиђене Законом о високом образовању, стандардима и Статутом Рударско-геолошког факултета Универзитета у Београду. Докторска дисертација представља оригинално научно дело и има научни и потенцијални практични допринос у синтези и карактеризацији микропорозних арсената и фосфата до сада непознатог хемијског састава и кристалографских карактеристика. На основу приказаних резултата, закључака и објављених радова који су проистекли из тезе (3 рада у међународним часописима, 5 саопштења на међународним и домаћим конференцијама) може се констатовати да је кандидат Сабина Ковач, дипл. инж. геологије, успешно завршила докторску дисертацију у складу са предметом и постављеним циљевима истраживања. Комисија за оцену и одбрану докторске дисертације предлаже Наставно-научном већу Рударско-геолошког факултета Универзитета у Београду да прихвати извештај, упути на коначно усвајање Већу научних области техничких наука Универзитета у Београду и одобри одбрану докторске дисертације када се за то стекну законски услови, пред комисијом у истом саставу.

Београд, 4. 5. 2015.

ЧЛАНОВИ КОМИСИЈЕ

Др Љиљана Карановић, ред. проф.
Рударско-геолошког факултета Универзитета у Београду

Др Предраг Вулић, научни сарадник
Рударско-геолошког факултета Универзитета у Београду

Др Тамара Ђорђевић, виши научни сарадник
Института за минералогiju и кристалографију Универзитета у Бечу