

DIPLOMSKI RADOVI, ŠK. 2017/18.

1. **Eksperimentalno i teorijsko ispitivanje antiradikalske aktivnosti 6-hidroksidopamina**, prof. dr Jasmina Dimitrić-Marković
2. **Eksperimentalno i teorijsko ispitivanje antiradikalske aktivnosti oktopamina**, prof. dr Jasmina Dimitrić-Marković. Biogeni aminи осим улоге у преношењу сигнала између ћелија, могу имати значајну улогу у заштити живих система од дејства слободних радикала, нарочито у централном нервном систему који је највише подложен дејству кисеоника и његових слободних радикала, а у коме је концентрација биогених амина већа него у остатку организма. Антиоксидациона активност биогених амина зависи од присуства и распореда одговарајућих функционалних група (амино и хидроксилних) у молекулу, које имају могућност да учествују у слободно-радикалским реакцијама. У ова два завршна рада ће се испитивати ин витро антирадикалска активност 6-хидроксидопамина и октопамина применом спектрофотометријских антирадикалских тестова (DPPH, ABTS и Trolox еквивалент) и применом метода компјутационе хемије. Квантитативни параметри редукције испитиваних радикала ће се упоредити са параметрима редукције једињења сличних структура ради успостављања релације структура-активност. У моделовању односа структуре и активности (SAR, structure-activity relationship) као молекулски дескриптори користиће се реакциони параметри израчунати применом теорије функционала густине (DFT) (применом програмског пакета Gaussian).
3. **Ispitivanje Au/TiO₂ kao elektrokatalizatora za nisko-temperaturske gorivne ћелије**, doc. dr Biljana Šljukić-Paunković.
4. **Elektroanalitičка детекција arsena na elektrodama na bazi zlata**, doc. dr Biljana Šljukić-Paunković.
5. **Kvantno-hemijsko određivanje potencijala standardne vodonične elektrode**, vanr. prof. dr Mihajlo Etinski. Teorijsko određivanje standardnog elektrodnog potencijala vodonične elektrode је složen проблем jer укључује израчунавање Gibsove energije solvatisanog protona. У раду ће бити примењена једnostavna računarsка метода за одређивање Gibsove energije solvatisanog protona засноване на линеарној вези између експерименталних pKa вредности алкохола и израчунате промене Gibsove energije njihove реакције deprotonovanja.
6. **Simulacija termodinamickih i strukturnih osobina vode**, vanr. prof. dr Mihajlo Etinski. У раду ће се користити потенцијали засновани на молекулској међународној и класична молекулска динамика да би се одредиле термодинамичке и структурне особине воде.
7. **Interakcija LixO_y vrsta sa površinama prelaznih metala - aspekti primene u Li-O₂ baterijama**, vanr. prof. dr Igor Pašti. Li-O₂ батерије су тренутно у фокусу истраживања као један од потенцијалних електрохемијских система за конверзију енергије будућности. Због одличних теоријских перформанси овог типа батерија потребно је разумети на који начин је могуће утицати на реакције које се одигравају на катоди Li-O₂ батерија. У оквиру овог рада коришћењем теорије функционала густине, биће анализирана интеракција LixO_y vrsta sa površinama prelaznih метала који могу да се користе као катоде у Li-O₂ батеријама. Биће анализиран утицај модификације електронске структуре на јачине интеракција и међународној и модификацији O₂ у присуству Li. Теоријски резултати биће допуњени експерименталним мерењима модификације кисеоника у аprotičним растворима Li-soli.
8. **Interakcija LixO_y vrsta sa ugljeničnim materijalima - analiza uticaja funkcionalizacije površine**, vanr. prof. dr Igor Pašti. Угљеничи материјали се интензивно испитују као катоде за Li-O₂ батерије. С друге стране, недостаје детаљно теоријско разумевање интакције LixO_y vrsta sa površinama угљеничних материјала, као и увид у могућности модификације интакције LixO_y sa угљеничним материјалима функцијом нжихове површине. У оквиру овог рада, коришћењем теорије функционала густине, биће анализирани механизми модификације O₂ у присуству Li на моделима

- funkcionalizovanog grafena. Poseban akcenat biće dat na sam pristup modeliranju interakcije LixOy sa ugljeničnim površinama.
- 9. **Adsorpcija atoma multivalentnih metala na funkcionalizovane površine grafena**, vanr. prof. dr Igor Pašti. Ugljenični materijali nalaze široku primenu u različitim sistemima za konverziju energije, između ostalih i u elektrohemiskim kondenzatorima. Kako bi se razumele performanse ovih sistema za konverziju energije neophodno je imati detaljan uvid u interakciju vrsta prisutnih u elektroliitu sa površinama ugljeničnih materijala. Ovaj rad će kombinovati eksperimentalno i teorijsko istraživanje elektrohemiskog ponašanja funkcionalizovanih grafenskih materijala u rastvorima soli multivalentnih metala.
 - 10. **Квантномеханичко проучавање реакције циклизације катјона фенилетиламина**, doc. dr Miroslav Ristić. Употребом програмског пакета Гаусијан рачунале би се структуре продуката и реактаната у реакцији циклизације катјона фенилетиламина и његових деривата, као и структуре прелазних стања.
 - 11. **Квантномеханичко одређивање киселинских константи**, doc. dr Miroslav Ristić. Киселинске константе примарних амина би биле одређиване из промене Гипсове слободне енергије реактаната и продуката, који би били третирани заједно са молекулама воде који се за њих непосредно вежу у воденим растворима. Структуре и енергије рачунале би се у програмском пакету Гаусијан.
 - 12. **Uticaj reakcionih parametara na redukciju grafen oksida u prisustvu mikrotalasnih polja**, prof. dr Borivoj Adnađević.
 - 13. **Sorpција нафтних derivata na trodimenzionalnom samoorganizovanom grafenu**, prof. dr Borivoj Adnađević.
 - 14. **Umrežavajuća slobodnoradikalска polimerizacija akrilne kiseline u uslovima hidrodinamičke kavitacije**, prof. dr Borivoj Adnađević.
 - 15. **Upotreba fluorescentnog detektora u tečnoj hromatografiji** – doc. dr Maja Milojević Rakić
 - 16. **Određivanje i uklanjanje zagadivača iz vodenih rastvora** – doc. dr Maja Milojević Rakić
 - 17. **Uticaj spoljašnjeg katjona na parametre jedinične ćelije jonski izmenjenih zeolita** – doc. dr Bojana Nedić Vasiljević
 - 18. **Spektrofotometrijsko ispitivanje uticaja pH vrednosti na rastvore molibdenvanadata** – doc. dr Bojana Nedić Vasiljević
 - 19. **Sinteza i karakterizacija zeolit-TiO₂ nanokompozita**, prof. dr Ljiljana Damjanović-Vasilić. Kompoziti zeolita i titan oksida su bifunkcionalni materijali koji predstavljaju kombinaciju adsorbenta i fotokatalizatora i imaju veliki potencijal u procesima dekontaminacije. U ovom radu će biti isprobani različiti načini sinteze i dobijeni materijali će biti okarakterisani metodama difrakcije X-zračenja na prahu i infracrvene spektroskopije.
 - 20. **Analiza gleđosane srednjevekovne keramike ramanskom spektroskopijom**, prof. dr Ljiljana Damjanović-Vasilić. Glazura je tanak, staklasti sloj na površini keramičkog proizvoda. Student će u ovom radu napraviti pregled literature o različitim načinima izrade glazura kroz istoriju i pokazati na primerima gleđosanih uzoraka srednjevekovne keramike nadjene na Beogradskoj tvrđavi kako se korišćenjem nedestruktivne metode analize kakva je ramanska spektroskopija mogu proceniti temperature pečenja glazura i identifikovati pigmenti kojima je predmet dekorisan.
 - 21. **Karbonizovani biokompoziti dopirani atomima fosforom i sumporom za primenu u superkondenzatorima**, doc. dr Nemanja Gavrilov. Uređaji za skladištenje energije bazirani na superkondenzatorima predstavljaju alternativu za punjive baterije zahvaljujući visokoj energetskoj gustini i izuzetnoj stabilnosti pri cikliranju. U ovom diplomskom radu bi se korišćenjem metoda ciklične voltametrije i impedansne spektroskopije ispitati ugljenični materijali sa kovalentno vezanim atomima fosfora i sumpora, dobijeni sagorevanjem biomase, za primenu u superkondenzatorima.

- 22. Ispitivanje reakcije redukcije kiseonika na karbonizovanim biokompozitima dopiranim atomima fosfora i sumpora**, doc. dr Nemanja Gavrilov. Heteroatomima dopirani (B, N, S, P,...) porozni ugljenični materijali privukli su priličnu pažnju zbog njihove obimne primene kao katalizatora reakcije redukcije kiseonika u gorivnim ćelijama i superkondenzatorima. U ovom diplomskom radu bi se korišćenjem metoda ciklične voltametrije i impedansne spektroskopije ispitala aktivnost ugljenični materijali sa kovalentno vezanim atomima fosfora i sumpora, dobijeni sagorevanjem biomase, za reakciju redukcije kiseonika.
- 23. Analiza vodoničnih veza i steking interakcija u dimerima aromatičnih karboksilnih kiselina pomoću teorije funkcionala gustine**, vanr. prof. dr Milena Petković. Student će procenjivati energiju vodoničnih veza i steking interakcija u odabranim dimerima aromatičnih karboksilnih kiselina, kao i uticaj supstituenata na jačinu međumolekulskih interakcija.
- 24. Teorijska analiza sendvič jedinjenja benzena**, vanr. prof. dr Milena Petković. Student će pomoću teorije funkcionala gustine ispitivati svojstva jedinjenja poznatih kao *sendvič jedinjenja benzena*, kod kojih je jon metala smešten između dva paralelno postavljena molekula benzena.
- 25. Uticaj galne kiseline na dinamiku Bray-Liebhafsky (BL) oscilatorne reakcije**, prof. dr Dragomir Stanislavljev, (Jelena Maksimović, Maja Pagnaco). Postaviće se eksperiment u kome se odvija oscilatorna BL reakcije karakteristična po periodičnoj evoluciji intermedijera. Ovakav način evolucije bitno odstupa od monotonog približavanja ravnotežnom stanju i jos uvek ne postoji detaljan mehanizam procesa kao ni mogućnost praćenja svih reakcionih intermedijera. O mogućim reakcionim intermedijerima zaključuje se indirektno preko odgovora sistema na dodatak spoljnih reagenasa.
- 26. Ispitivanje uticaja brzine mešanja na oscilatornu evoluciju Bray-Liebhafsky (BL) reakcije**, prof. dr Dragomir Stanislavljev (Itana Nuša-Bubanja, Kristina Stevanović). U poslednje vreme sve je više pokazatelja da se u mehanizmu procesa nalaze i heterogeni procesi vezani za nukleaciju gasovite faze. U tom cilju će se postaviti eksperimenti i ispitati dinamika reakcije pri različitim brzinama mešanja reakcionog rastvora.
- 27. Numerička integracija diferencijalnih jednačina metodom Runge-Kuta**, prof. dr Dragomir Stanislavljev (Stevan Mačešić). Sistemi diferencijalnih jednačina u hemijskoj kinetici se samo u malom broju slučajeva mogu rešiti analitički. Zbog toga se pribegava numeričkom rešavanju (integraljenju) pri čemu je jedna od često primenjivanih metoda Runge-Kuta. Kroz ovu temu će se studenti upoznati sa osnovnim idejama na kojima je ova metoda zasnovana kako bi je mogli primenjivati u konkretnim problemima.
- 28. Ispitivanje autokatalitičkih reakcija u laboratoriji**, prof. dr Dragomir Stanislavljev (Ana Stanojević, Vladimir Marković). Neki produkti raka mogu da ubrzavaju sopstveno stvaranje što može biti od velikog značaja za modeliranje složenijih sistema. Ispitaće se mogućnost postavke eksperimenta koji bi se mogao pratiti rapolozivim eksperinetalnim tehnikama,
- 29. Rad Mihajla Petrovića Alasa vezan za razvoj fizičkohemiske teorije**, prof. dr Dragomir Stanislavljev (Vladimir Marković, Ljiljana Kolar-Anić). Naš poznati matematičar bavio se i rešavanjem diferencijalnih jednačina vezanih za hemijsku kinetiku. Na osnovu rapolozive literature i uz pomoć asistenta, pogledaće se ovi radovi vezani za ovu tematiku ukratko prikazati njihov sadržaj sto ce biti od šireg značaja za istorijat fizičkohemiskih nauka u našoj zemlji.
- 30. Analiza uzoraka keramike spektroskopijom laserski indukovane plazme** (INN Vinca), vanr. prof. dr Miroslav Kuzmanović
- 31. Kvalitativna analiza keramickih glazura spektroskopijom laserski indukovane plazme** (INN Vinca), vanr. prof. dr Miroslav Kuzmanović.
- 32. Određivanje kritične micelarne koncentracije anjonskog surfaktanta AOT (bis(2-etilheksil)sulfosukcinat natrijumova so)**, vanr. prof. dr Miloš Mojović.

33. Kreiranje MATLAB aplikacije za proračune parametara složenih lipidnih smeša, vanr. prof. dr Miloš Mojović.
34. Sinteza i karakterizacija kopolimernih PLGA (poli(mlečna-ko-glikolna kiselina)) vezikula, vanr. prof. dr Ana Popović-Bijelić
35. Uticaj katjona na fizičkohemiske karakteristike AOT (bis(2-etilheksil)sulfosukcinat natrijumova so) vezikula, vanr. prof. dr Ana Popović-Bijelić.
36. Dobijanje ugljeničnog materijala za superkondenzatore iz Koka Kole, prof. dr Nikola Cvjetićanin.
37. Dobijanje ugljeničnog materijala za superkondenzatore iz Pepsi Kole, prof. dr Nikola Cvjetićanin. Objasnjenje: I Koka Kola i Pepsi Kola imaju veliki sadržaj šećera i drugih aditiva što omogućuje da se hidrotermalnom rekcijom uz odgovarajuću aktivaciju dobiju ugljenični materijali koji odlično sorbaju CO₂ ili mogu služiti za izradu superkondenzatora. Kako se obe Kole kojima je istekao rok trajanja bacaju, ovo je jedan od načina da se korisno iskoriste.
38. Izračunavanje potencijalne energije H₂⁺ jona u okviru Born-Openhajmerove aproksimacije korišćenjem eliptičnih koordinata, doc. dr Radomir Ranković.
39. Primena linearne varijacione metode na molekul H₂⁺, doc. dr Radomir Ranković.
40. NiSn legure kao anodni materijali Litijum-jon baterija, doc. dr Ivana Stojković (Slavko Mentus, Milica Vučković).
41. Termogravimetrijsko ispitivanje kinetike redukcije ferioksida vodonikom, doc. dr Nemanja Gavrilov (Slavko Mentus).
42. Elektrohemijsko ponašanje Li_{1+x}CryMn_{2-x-y}O₄ u litijum i natrijum jonskim baterijama, doc. dr Ivana Stojković-Simatović. U okviru ovog završnog rada ispitala bi se interkalacija/deinterkalacija jona litijuma/natrijuma u nekoliko materijala različitog sastava iz vodenog rastvora jona litijuma/natrijuma pomoću metode ciklične voltametrije. Student bi stekao osnovna znanja o načinu rada i karakteristikama litijum /natrijum jonskih baterija, uporedio rezultate interkalacije različitih jona i savladao osnovne principe metode ciklične voltametrije.
43. Sinteza i karakterizacija katodnog materijala NaMnO₄ za natrijum jonske baterije, doc. dr Ivana Stojković-Simatović. U okviru ovog završnog rada planirano je da se uradi sinteza materijala NaMnO₄ koji bi našao primenu kao katodni materijal u natrijum jonskim baterijama. Metode karakterizacije koje bi se koristile su rendgenska difrakcija na prahu, skenirajuća elektronska mikroskopija, merenje raspodele veličine čestica metodom difrakcije laserske svetlosti i ciklična voltametrija.
44. Tema iz radiohemije, naknadno će se objaviti naziv, izrada Vinča, doc. dr Marko Daković.
45. Dipolno-vezana stanja kod anjona, vanr. prof. dr Stanka Jerosimić. Pojedini molekuli imaju sposobnost da elektron vezuju na osnovu toga što poseduju veliki električni dipolni moment, takva stanja nisu valentna. Teorijski će se istraživati pojedini anjoni koji nastaju tom vrstom veze.
46. Anjoni HC₉N⁻, određivaće se afinitet prema elektronu neutralna HC₉N koji je detektovan u interstelarnom prostoru, i pokušati odgovoriti na pitanje zašto nije detektovan odgovarajući anjon. Određivaće se strukturalni izomeri i analizirati njihova raspodela nanelektrisanja i relativan odnos energija.
47. Teorijsko ispitivanje molekula SiCN i SiNC, vanr. prof. dr Stanka Jerosimić (Milan Milovanović).