

Дипломски радови у школској 2018/19. години

1. Синтеза линијских спектра атома и јона (теоријски рад, потребно елементарно познавање MatLab-a), ванр. проф. др Мирослав Кузмановић
2. Спектри алкалних елемената у бутанском пламену (експериментални рад, на Факултету), ванр. проф. др Мирослав Кузмановић
3. Антиоксидациона активност деривата хидроксибензојеве киселине: експериментална и теоријска анализа, проф. др Јасмина Димитрић-Марковић. У оквиру ове теме студенти ће спектрофотометријским тестовима (DPPH и ABTS) одредити антиоксидациону активност моно-, ди- и три-супституисаних деривата бензојеве киселине и продискутовати утицај броја хидроксилних група и њиховог положаја на активност. Теоријским DFT методама ће бити израчунати параметри значајни за антиоксидациону активност и корелисани са експерименталним подацима. На основу термохемијских параметара биће одређен највероватнији механизам активности.
4. Интрамолекулски прелази са преносом наелектрисања у бензоил дериватима: експериментална и теоријска анализа, проф. др Јасмина Димитрић-Марковић. Донорске и акцепторске особине супституената бензоил деривата утичу на померање апсорпционих максимума у електронским спектрима. Предложена тема се односи на снимање електронских спектра групе од 11 деривата и дискусију утицаја ефеката супституената. Експериментални подаци ће бити упоређени са вредностима израчунатим на основу емпиријских правила. Структуре свих деривата ће бити оптимизоване DFT методама и одређене енергије потребне за ексцитацију. Поређењем експерименталних и теоријских величина биће продискутована могућност коришћења ових метода за предвиђање експерименталних енергија електронских прелаза.
5. Теоријска анализа изотопског ефекта у малим кластерима воде, ванр. проф. др Милена Петковић. Студент ће оптимизовати структуре кластера воде који садрже до шест мономера и анализирати промене у вибрациоим својствима када се атом водоника (протијума) замени деутеријумом.
6. Анализа антиоксидативних својстава витамина Ц помоћу теорије функционала густине, ванр. проф. др Милена Петковић. Студент ће овладати оптимизацијом структура помоћу програмског пакета Gaussian и анализирати реакције преноса водоника са витамина Ц на одабране радикале.
7. Проучавање реакција преноса атома водоника између фенолних једињења и пероксилног радикала, ванр. проф. др Михајло Етински. Рад је теоријског карактера. Студент ће се током рада упознати са теоријом функционала електронске густине као и основама теоријске хемије. Циљ рада је да се одреде реакционе баријере за реакције дате у наслову рада.
8. Проучавање реакција преноса атома водоника између фенолних једињења и метокси радикала, ванр. проф. др Михајло Етински. Рад је теоријског карактера. Студент ће се током рада упознати са теоријом функционала електронске густине као и основама теоријске хемије. Циљ рада је да се одреде реакционе баријере за реакције дате у наслову рада.
9. Кинетика Zn^{2+}/Zn електроде у воденим електролитичким растворима, ванр. проф. др Игор Пашти. Рад је експерименталног типа са акцентом на испитивање кинетике Zn^{2+}/Zn електроде у рН неутралним воденим електролитичким растворима. Посебан акценат биће да на морфолошке промене електроде током великог броја поновљених

циклуса анодног растварања и катодног таложења Zn са циљем интеграције ове електроде у хибридне системе за конверзију енергије.

10. Кинетика Ni^{2+}/Ni електроде у воденим електролитичким растворима, ванр. проф. др Игор Пашти. Експериментално ће се испитати кинетика Ni^{2+}/Ni електроде у различитим електролитичким растворима приближно неутралног рН са циљем могуће примене Ni високо развијене површине у хибридним системима за конверзију енергије.
11. Праћење концентрације трицијума у кишници, доц. др Марко Даковић/ др Марија Јанковић, виши научни сарадник, Институт Винча. Трицијум у кишници настаје као производ нуклеарних реакција са језгрима атома азота у горњој атмосфери. После одређеног временског периода у облику тритиране воде прелази у тропосферу и у облику падавина доспева до земљине површине. У оквиру овог рада студент ће техником течне сцинтилационе спектрометрије одређивати садржај трицијума у кишници која је сакупљана у дужем временском периоду. Експериментални део рада ће се радити у Институту Винча.
12. Квантификација ^{90}Sr у животним намирницама, доц. др Марко Даковић/ др Наташа Сарап, научни сарадник, Институт Винча. ^{90}Sr је у животну средину доспео средином и крајем прошлог века као последица надземних нуклеарних експлозија и нуклеарног акцидента у Чернобиљу. Будући да ^{90}Sr прати метаболички пут калцијума, може лако доспети у пољопривредне културе и даље ланцем исхране у домаће животиње. Циљ овог дипломског рада је утврђивање нивоа ^{90}Sr у животним намирницама биљног и животињског порекла. Експериментални део рада ће се радити у Институту Винча.
13. Фотокаталитичка разградња атенолола помоћу нанокмпозита зеолит- TiO_2 , проф. др Љиљана Дамјановић-Василић. Рад је експериментални. Биће тестирана фотокаталитичка разградња фармацеутски активне супстанце (атенолола) помоћу нанокмпозита зеолита клиноптилолит и ZSM-5 типа и TiO_2 , са циљем уклањања из отпадних вода. За праћење процеса каталитичких трансформација биће примењена UV/VIS спектроскопија. Коришћени материјали ће бити окарактерисани методама дифракције X-зрачења на праху (XRPD), инфрацрвеном (IC) спектроскопијом, DLS - одређивањем величине наночестица и зета потенцијала.
14. Синтеза и карактеризација нанокмпозита Се-измењених зеолита и TiO_2 , проф. др Љиљана Дамјановић-Василић. Рад је експериментални. Процесом јонске измене из воденог раствора биће добијени Се-измењен природни зеолит клиноптилолит као и вештачки зеолити H и ZSM-5 типа. Затим ће добијени материјали бити коришћени у процесу синтезе композитног материјала са нано честицама TiO_2 . Испитивани узорци ће бити окарактерисани применом дифракције X-зрачења на праху (XRPD), инфрацрвеном (IC) спектроскопијом и дифузно рефлексионом спектроскопијом (DRS).
15. Експериментална поставка Briggs-Rauscher-ове осцилаторне реакције и испитивање ефеката механичког мешања, проф. др Драгомир Станисављев. Поставио би се експеримент за испитивање осцилаторне Briggs-Rauscher-ове осцилаторне реакције. Динамика реакције би се пратила електрохемијски помоћу платинске електроде повезане са компјутером. Циљ рада би био пронаћи експерименталне услове при којима би се ефекат мешања могао довољно нагласити и окарактерисати преко главних карактеристика добијених осцилограма.
16. Поређење Bray-Liebhafsky осцилаторне реакције у реакторима различитих запремина, проф. др Драгомир Станисављев. Циљ рада је пронаћи експерименталне услове при којима би се осцилаторна динамика, при истим почетним концентрацијама реактаната и температуре, могла добити у посудама различитих односа површина/запремина.

- Различите карактеристике добијених осцилограма указивале би на утицај хетерогених процеса у реакционом механизму.
17. Одређивање антиоксидативног капацитета ртањског чаја (*Satureja montana*), ванр. проф. др Милош Мојовић. Експериментална тема која се бави применом EPR спектроскопије за одређивање капацитета екстракта природних производа за уклањање реактивних кисеоничних и азотних врста.
 18. Одређивање антиоксидативног капацитета чаге (*Inonotus obliquus*), ванр. проф. др Милош Мојовић. Експериментална тема која се бави применом EPR спектроскопије за одређивање капацитета екстракта природних производа за уклањање реактивних кисеоничних и азотних врста.
 19. Испитивање утицаја пчелињег отрова на хумани серум албумин, ванр. проф. др Милош Мојовић. Тему обрађује студент који ће обезбедити узорак пчелињег отрова.
 20. Поређење антиоксидативних капацитета грчко планинског и шарпланинског чаја (*Sideritis scardica*), ванр. проф. др Ана Поповић Бијелић. Експериментална тема која се бави применом EPR спектроскопије за одређивање капацитета екстракта природних производа за уклањање реактивних кисеоничних и азотних врста.
 21. Одређивање утицаја поларности растварача на карактеристике EPR спектра спинске пробе 16-DS (16-doxyl stearic acid), ванр. проф. др Ана Поповић Бијелић. Експериментална тема која се бави применом EPR спектроскопије за одређивање утицаја поларности расварача на висину, ширину и симетричност EPR сигнала спински обележене масне киселине.
 22. Испитивање промена на митохондријама у Алцхајмеровој болести, ванр. проф. др Ана Поповић Бијелић. Експериментална тема која се бави применом EPR спектроскопије за одређивање промена на митохондријама изолованих из јетре мишева оболелих од Алцхајмерове болести.
 23. Креирање MATLAB апликације за прорачуне параметара сложених липидних смеша, ванр. проф. др Милош Мојовић. Креирање stand-alone апликације која израчунава параметаре сложених липидних смеша (нпр. број молекула по липозому, унутрашњу запремину липозома итд.) на основу полазних компонената смеше.
 24. Решавање радијалне Шредингерове једначине атома водоника методом лествичастих оператора, доц. др Радомир Ранковић
 25. Примена линеарне варијационе методе на молекула H_2^+ , доц. др Радомир Ранковић.
 26. Синтеза и карактеризација желатин-графен нанокмпозита, проф. др Боривј Аднађевић, др Јовановић, научни саветник. Незадовољавајућа механичка својства хидрогелова један су од ограничавајућих фактора њихове шире примене. Способност желатина да *in situ* редукује графен-оксид у графен и на тај начин додатно ојача мрежу хидрогела представља нов метод за добијање нано-композитних хидрогелова дефинисаних физичко-хемијских својстава. У овом раду биће испитан утицај: концентрације раствора желатина, концентрације раствора графен-оксида, реда мешања, темпеартуре и времена на кинетику формирања хидрогела, степен редукције GO у графен и механичка и термофизичка својства добијених композита.
 27. Утицај оперативних параметара хидродинамичке кавитационе екстракције на степен екстракције уља из семена грожђа, проф. др Боривј Аднађевић. Хидродинамичка кавитационе екстракција је нова, брза, високоселективна и енергетски ефикасна технологија за екстракцију различитих супстанци из различитих материјала. У овом раду биће испитан: утицај операционих параметара (тип кавитатора, кавитациони број кавитатора, број пролаза, температура, масени однос, расварач, семе грожђа, тип растварача) на степен екстракције уља из семена грожђа.

28. Кинетика каталитичке деполимеризације полиетилена ниске густине у дизел гориво, проф. др Боривј Аднађевић, др Јовановић, научни саветник, др Станковић, научни сарадник. Отпадни полимерни материјали (полиетилен, полипропилен, PET) представљају озбиљна еколошки проблем савременог света. Каталитичка деполимеризација полимерних материјала у гориво представља ефикасни поступак за претварање отпадних материјала у економски исплативе материјале. У овом раду биће испитан утицај: типа зеолита, концентрације зеолита на кинетику (кинетички модел, кинетичк акомплексност, вредности кинетичких параметара) неизотермне каталитичке деполимеризације полиетилена ниске густине у дизел гориво.
29. (Електрохемијска) импедансна спектрометрија на примеру електрохемијског кондензатора, доц. др Немања Гаврилов. Студент ће се упознати са методом EIS. Извршиће моделирања основних процеса који се одвијају на електроди одговарајућим еквивалентним електричним колом, затим ће софтверски симулирати одговор теоријског система и упоредити га са литературом. У наставку ће снимити одговор реалног електрохемијског кондензатора и покушати моделирање испитаног реалног система. За дати систем ће овом методом бити одређени отпори електролита, трансфера наелектрисања, капацитет и Варбургова импеданса.
30. Електрохемијски кондензатори на бази карбонизованих угљеника, доц. др Немања Гаврилов. План је да се студент упозна са концептом рада електрохемијског кондензатора и појавом псеудокапацитивности. Методом цикличне волтаметрије ће одредити капацитете за серију угљеничних материјала при различитим брзинама поларизације. Затим ће погодним поступцима, а на основу експериментално добијених вредности, бити покушано раздвајање доприноса двојног електричног слоја и псеудокапацитивност укупној вредности капацитета кондензатора и дати објашњење за ову појаву код овог типа материјала.
31. *Ab initio* израчунавања електронских стања анјона C_2N^- : валентна и диполно-везана стања, ванр. проф. др Станка Јеросимић.
32. *Ab initio* израчунавања електронских стања анјона C_4N^- : валентна и диполно-везана стања, ванр. проф. др Станка Јеросимић. За обе теме студент помоћу Хартри-Фок рачуна одређује могуће електронске конфигурације основног и побуђених електронских стања, одређује равнотежну геометрију, електрични диполни момент користећи различите методе. Предвиђа могуће постојање диполно-везаних стања. Пре тога налази и анализира из литературе све што је до сада рађено о поменутиим хемијским врстама и њиховим неутралима.
33. *Ab initio* одређивање изомера кластера атома Mn и S, ванр. проф. др Станка Јеросимић, др М. Миловановић, научни сарадник. Студент помоћу програмског пакета Gaussian рачуна могуће изомере кластера мангана и сумпора, налази из литературе погодне функционале и атомске базе за поменуте атоме; проверава симетрију равнотежних геометрија кластера и њихову мултиплетност.
34. Анализа пикова у анализи сигнала, проф. др Никола Вукелић. Које се математичке методе користе у анализи пикова - положају, површини, преклопљени пикова, деконволуција.
35. Одређивање цијанида у води, ванр. проф. др Љубиша Игњатовић. Примена аналитичких метода које су доступне за откривање, мерење и праћење цијанида у животној средини. Методе и технике мерења: спектрофотометријска, јон-селективна потенциометријска и јон-хроматографска.
36. Примена Статичке *headspace* екстракције за одређивање лако испарљивих органских једињења, ванр. проф. др Љубиша Игњатовић. Постоји неколико техника које се

најчешће користе за екстракцију лако испарљивих органских једињења (VOC). Обзиром да су аналити испарљиви, већина ових техника је усмерена на припрему узорака за гаснохроматографско одређивање, иако су погодне и за многе друге инструменталне методе.

37. Конформациона анализа фенилетиламина, доц. др Мирослав Ристић. У програмском пакету Гаусијан рачунале би се енергије различитих конформера фенилетиламина са неколико различитих базиса и функционала.
38. Квантна Монте Карло метода у анализи хармонијског осцилатора, доц. др Мирослав Ристић. Развијала би се Монте Карло симулација са циљем да се утврди таласна функција основног вибрационог стања хармонијског осцилатора.
39. Моделирање адсорпције загађивача кинетиком II реда и применом адсорпционих изотерми, доц. др Маја Милојевић-Ракић. Данас је учестало коришћење кинетичких једначина за реакције II реда у моделовању процеса адсорпције када то нема физичког смисла. Осим тога, математичке трансформације једначина адсорпционих изотерми се злоупотребљавају у циљу подизања фактора корелације. Кандидат би се бавио анализом примера доступних у литератури.
40. Синтеза и карактеризација композитних материјала на бази соли хетерополи киселине и зеолита, доц. др Маја Милојевић-Ракић. Композити ће бити синтетисани при различитим условима и са различитим масеним односима полазних компоненти. Биће испитивани различити зеолити као чврсти носачи за нерастворне соли хетерополи киселине Keggin-овог типа. Методе које ће бити примењене за карактеризацију композитних материјала су инфрацрвена и раманска спектроскопија и сканирајућа-електронска микроскопија.
41. Примена V2O5 као електродног матријала у воденим батеријама, ванр. проф. др Ивана Стојковић-Симатовић. У оквиру овог завршног рада испитала би се интеркалација/деинтеркалација различитих јона из воденог раствора помоћу методе цикличне волтаметрије и хронопотенциометрије. Студент би стекао основна знања о начину рада и карактеристикама различитих водених батерија које раде на принципу интеркалације/деинтеркалације алкалних јона, упоредио резултате интеркалације различитих јона и савладао основне принципе методе цикличне волтаметрије и хронопотенциометрије.
42. Карактеризација катодног материјала MgMnO4, ванр. проф. др Ивана Стојковић-Симатовић. У оквиру овог завршног рада планирано је да се уради карактеризација материјала MgMnO4 који би нашао примену као катодни материјал у магнезијум јонским батеријама. Методе карактеризације које би се користиле су рендгенска дифракција на праху, мерење расподеле величине честица методом дифракције ласерске светлости и циклична волтаметрија.
43. Добијање угљеничних материјала из отпадне кафе, проф. др Никола Цвјетићанин.
44. Електрокатализа оксидације борхидрида материјалима на бази сребра, ванр. проф. др Биљана Шљукић Паунковић.
45. Бифункционални неплатински електрокатализатори за реакцију редуције и издвајања кисеоника, ванр. проф. др Биљана Шљукић Паунковић.
46. Испитивање утицаја резорцинола на динамику Bray Liebhafsky осцилаторне реакције, проф. др Драгомир Станисављев. Поставиће се експеримент за компјутерско праћење Bray-Liebhafsky осцилаторне реакције и испитати промена карактеристичних параметара осцилограма у присуству различитих концентрација резорцинола.
47. Утицај гранулације природног зеолита на динамику Briggs-Rauscher осцилаторне реакције, проф. др Драгомир Станисављев. Поставиће се експеримент за компјутерско

праћење Briggs-Rauscher осцилаторне реакције и испитати промена карактеристичних параметара осцилограма у присуству различитих природних зеолита различите гранулације честица.