

## **Spisak tema za diplomske radove u 2019/20. god**

### **1. Teorijska analiza uticaja hemijskog okruženja fosfora kao dopanta u grafenu na mogućnost skladištenja jona alkalnih metala**

Grafen, monosloj sp<sup>2</sup> hibridizovanih ugljenikovih atoma organizovanih u heksagonalnu rešetku, smatra se obećavajućim materijalom za niz primena. Međutim, čist grafen je hemijski inertan i relativno slabo interaguje sa vrstama od značaja za moguće elektrohemijske primene (u sistemima za konverziju i skladištenje energije: metal-jonskim baterijama, gorivnim ćelijama, superkondenzatorima). Stoga se razvijaju različite strategije za poboljšanje reaktivnosti grafena prema ciljanim hemijskim vrstama. Najčešće se radi o uvođenju defekata u grafensku ravan dopiranjem i funkcionalizacijom. Cilj ovog rada je da se pomoću proračuna na bazi teorije funkcionala gustine (DFT) ispita kako promena hemijskog okruženja fosfora, kao supstituciono uvedenog dopanta na grafenu, utiče na jačinu njegove interakcije sa jonima alkalnih metala i mogućnost njihovog skladištenja pomoću ovako funkcionalizovanog grafena.

Mentor: doc. Ana Dobrota

### **2. Teorijska analiza oksidacije grafena sa metalnim defektima**

Grafen, monosloj sp<sup>2</sup> hibridizovanih ugljenikovih atoma organizovanih u heksagonalnu rešetku, smatra se obećavajućim materijalom za niz primena. Međutim, čist grafen je hemijski inertan. Prisustvo defekata na grafenu može značajno promeniti njegova svojstva od značaja za različite primene, te se razvijaju različite strategije za poboljšanje reaktivnosti grafena prema ciljanim hemijskim vrstama. Najčešće se radi o uvođenju defekata u grafensku ravan dopiranjem i funkcionalizacijom. U realnim grafenskim uzorcima najčešće su prisutne kiseonične funkcionalne grupe, odnosno u određenoj meri su oksidovani. Cilj ovog rada je da se pomoću proračuna na bazi teorije funkcionala gustine (DFT) ispita oksidacija grafena koji poseduje metalne defekte, uvođenjem kiseoničnih funkcionalnih grupa na grafensku ravan i u blizinu defekta.

Mentor: doc. Ana Dobrota

### **3. Masena spektrometrija gasnih smeša.**

Rad je eksperimentalni, student bi stekao iskustvo u radu sa masenim spektrometrom i u tumačenju snimljenih masenih spektara.

Mentor: doc. Miroslav Ristić

### **4. Transportne osobine elektronskih rojeva u radiofrekventnom električnom i magnetnom polju.**

Rad je teorijski, pomoću Monte Carlo simulacije bi se simulisalo kretanje roja elektrona u radiofrekventnim poljima i proučavo bi se uticaj jačine polja i frekvencije na transportne osobine roja.

Mentor: doc. Miroslav Ristić

### **5. Izračunavanje očekivanih vrednosti operatora $r^k$ u atomu vodonika.**

Mentor: doc. Radomir Ranković

**6. Određivanje energija i talasnih funkcija čestice u 3D jami sa beskonačno visokim zidovima - sferosimetrični i slučaj sferne ljuske konačne debljine.**

Mentor: doc. Radomir Ranković

Prethodne dve teme (5 i 6) su teorijske, u oba slucaja cilj je da student primeni svoje znanje steceno na kursevima Atomistike i Kvantne hemije na relativno jednostavne probleme sa kojima se do sada nije susretao. Podrazumeva se da ce student, ako vec ne zna, ovom prilikom nauciti i osnove programiranja u Matematici.

**7. Ispitivanje rastvorljivosti Ag soli volframfosforne kiseline u kompozitima na bazi zeolita**

Rad je eksperimentalni. Kompoziti će biti sintetisani pri različitim uslovima i sa različitim masenim odnosima polaznih komponenti. Analiza stabilnosti i količina vezanog srebra biće ispitivana metodom atomske-apsorpcione sprektroskopije. Metode koje će biti primenjene za karakterizaciju kompozitnih materijala su infracrvena i ramanska spektroskopija.

Mentor: Maja Milojević Rakić

**8. Citotoksičnost pesticida i njihovih formulacija.**

Rad je teorijski i obuhvataće analizu literaturnih podataka i eksperimentano dobijenih rezultata za citotoksičnosti pesticida, Biće ispitivan uticaj vezivanja pesticida za različite kompozite zeolita na modulaciju citotoksičnog dejstva.

Mentor: Maja Milojević Rakić

**9. Proučavanje adsorpcije guanina na grafenu**

Teorijska tema. Student ce simularati adsorpciju guanina na grafenu pomocu DFTB metode. Razmatrace se organizacija guanina u trake i kvartete.

Mentor: v.prof. Mihajlo Etinski

**10. Proučavanje adsorpcije perilena diimida na grafenu.**

Teorijska tema. Student ce simularati adsorpciju rilenske boje na grafenu pomocu DFTB metode. Razmatrace se oblici organizacije boje na površini.

Mentor: v.prof. Mihajlo Etinski

**11. Ispitivanje antioksidativne aktivnosti i citotoksičnosti seskviterpenoidnog hidrohina avarola, integrisanog u lipozome.**

Mentor: v.prof. Miloš Mojović

**12. Ispitivanje antioksidativne aktivnosti i citotoksičnosti avarona - oksidovanog oblika seskviterpenoidnog hidrohina avarola, integrisanog u lipozome.**

Mentor: v.prof. Miloš Mojović

**13. Napredna analiza EPRI slika mišjeg modela inflamacije, primenom programa MATLAB.**

Mentor: v.prof. Miloš Mojović

**14. Elektrohemijski senzor za detekciju pesticida**

Mentor: v.prof. Igor Pašti

### **15. Određivanje i poređenje parametara Kuteki-Levič jednačine za slučaj reakcije redukcije kiseonika**

Eksperimentalni rad. Cilj rada je upoznavanje studenata sa osnovnim principom rada i tipovima gorivnih ćelija, ispitivanje parametara katodne reakcije, reakcije redukcije kiseonika, u zavisnosti od sastava elektrolita i upoređivanje sa dostupnim teorijskim vrednostima.

Mentor: v.prof. Biljana Šljukić Paunković

### **16. Optimizacija metode pripreme anode za alkalne gorivne ćelije**

Eksperimentalni rad. Cilj rada je upoznavanje studenata sa osnovnim principom rada alkalnih gorivnih ćelija i ispitivanje parametara pripreme anode (poput veziva koje se koristi za pripremu, kolicine aktivnog materijala, itd.) na aktivnost i performanse te elektrode.

Mentor: v.prof. Biljana Šljukić Paunković

### **17. Ispitivanje reakcije izdvajanja i redukcije kiseonika na ZnO**

Mentor: v.prof. Ivana Stojković Simatović

### **18. Oksidi vanadijuma kao katodni materijali u cink-jonskim i aluminijum-jonskim baterijama**

Mentor: v.prof. Ivana Stojković Simatović

### **19. FeC<sub>3</sub>N molekul: da li je stabilan i na koji način bi se mogao detektovati?**

Student pomoću DFT određuje moguće konstitucione izomere i nalazi izomer najniže energije. Pomoću DFT, Hartri-Fock i metode spregnutih klastera određuje ravnotežnu geometriju najnižeg stanja, frekvencije i električni dipolni moment, zatim analizira elektronsku konfiguraciju osnovnog i mogućih pobuđenih elektronskih stanja. Na osnovu oznake (terma) osnovnog stanja predlaže način detekcije. Student analizira iz literature sve što je do sada rađeno o sistemima metal- C<sub>3</sub>N radikal, tražeći da li postoje informacije o razmatranom molekulu.

Mentor: v.prof. Stanka Jerosimić

### **20. Ab initio određivanje izomera klastera atoma Mn i S**

Student pomoću programskog paketa Gaussian računa moguće izomere klastera mangana i sumpora, nalazi iz literature pogodne funkcionalne i atomske baze za pomenute atome; proverava simetriju ravnotežnih geometrija klastera i njihovu multipletnost.

Mentor: v.prof. Stanka Jerosimić

### **21. Dizajn jednostavnog uređaja za elektroforezu**

Tema podrazumeva praktičan rad na dizajnu jednostavnog uređaja za elektroforezu koji ima za svrhu demonstraciju koncepta ove fizičko-hemijske tehnike za razdvajanje i karakterizaciju biomakromolekula i koji će naći svoju upotrebu na vežbama iz predmeta Biofizička hemija 1.

Mentor: v.prof. Ana Popović-Bijelić

### **22. Razvoj nove metodologije za određivanje sadržaja vode u albuminskom hidrogelu korišćenjem EPR spektroskopije**

Tema je eksperimentalna, uključuje sintezu albuminskih hidrogelova i EPR spektroskopska merenja, kao i analizu spektralnih parametara na osnovu koje treba predložiti novu metodologiju

za određivanje sadržaja vode u hidrogelu. Za odabir ove teme neophodno je da student ima osnovno teorijsko znanje iz EPR spektroskopije i da pokazuje interes za samostalan eksperimentalni rad. Poželjno je da student ima položene ispite iz Molekulske spektrohemijske i Biofizičke hemije 1.

Mentor: v.prof. Ana Popović-Bijelić

### **23. Teorijska analiza cis-trans izomerizacije odabranih alkena**

U okviru ovog diplomskog rada, student će pomoću programa Gaussian analizirati tokove pomenutih reakcija i ispitivati uticaj supstituenata na visinu barijere ovih monomolekulskih reakcija.

Mentor: prof. Milena Petković

### **24. Analiza klastera helijuma, neona i argona pomoću teorije funkcionala gustine**

Student će procenu energije disperzionih interakcija i ispitivanje strukture malih klastera plemenitih gasova vršiti pomoću programa Gaussian.

Mentor: prof. Milena Petković

### **25. Sinteza i karakterizacija kompozita na bazi TiO<sub>2</sub> nanocevi i ZSM-5 zeolita**

Rad je eksperimentalni. U radu će biti sintetisane nanocevi TiO<sub>2</sub> koje će biti iskorišćene za dobijanje kompozita sa ZSM-5 zeolitom. Dobijeni materijali će biti okarakterisani metodama difrakcije X-zračenja na prahu i infracrvene spektroskopije. Biće ispitana fotokatalitička aktivnost nanocevi i dobijenih kompozita za razlaganje organskih boja (metil oranž).

Mentor: prof. Ljiljana Damjanović-Vasilić

### **26. Fotokatalitička razgradnja farmaceutski aktivne supstance ibuprofena na zeolit-TiO<sub>2</sub> nanokompozitima**

Rad je eksperimentalni. Fotokatalitička razgradnja je veoma značajna za uklanjanje zagađivača iz otpadnih voda. Kompoziti zeolita i TiO<sub>2</sub> predstavljaju kombinaciju adsorbenta i fotokatalizatora i imaju veliki potencijal u procesima dekontaminacije. U radu će kompoziti nanočestičnog TiO<sub>2</sub> i različitih zeolita biti dobijeni jednostavim postupkom sinteze. A zatim će biti ispitana njihova sposobnost fotokatalitičke razgradnje ibuprofena koja će biti praćena UV/VID spektroskopijom.

Mentor: prof. Ljiljana Damjanović-Vasilić

### **27. Fotokatalitička razgradnja farmaceutski aktivne supstance acetilsalicidne kiseline na zeolit-TiO<sub>2</sub> nanokompozitima**

Rad je eksperimentalni. U radu će kompoziti nanočestičnog TiO<sub>2</sub> i različitih zeolita biti dobijeni jednostavim postupkom sinteze. A zatim će biti ispitana njihova sposobnost fotokatalitičke razgradnje acetilsalicidne kiseline koja će biti praćena UV/VID spektroskopijom.

Mentor: prof. Ljiljana Damjanović-Vasilić

### **28. Određivanje hlorida u vodi**

Primena analitičkih metoda koje su dostupne za otkrivanje, merenje i praćenje hlorida u uzorcima česmenske, mineralne, rečne i morske vode. Metode i tehnike merenja: volumetrijske titracije, jon-selektivna potenciometrijska i jon-hromatografska. Rad je eksperimentalni.

Mentor: prof. Ljubiša Ignjatović

**29. Ispitivanje korelacije između elektrolitičke provodljivosti vode i sadržaja rastvorenih materija.**

U okviru ove teme student će ispitati navedenu korelaciju i predložiti empirijsku formulu iste. Ispitivaće se uzorci česmenske, mineralne, rečne i morske vode. Metode i tehnike merenja: gravimetrija, volumetrijske titracije, konduktometrija, rN-metrija, plamena fotometrija, jonska hromatografija. Rad je eksperimentalno-teorijski.

Mentor: prof. Ljubiša Ignjatović

**30. Sinteza atomskih spektara za uslove koji vladaju u spektrohemijskim plamenovima. Uticaj lakojonizujućih elemenata i hemijskih smetnji.**

Mentor: prof. Miroslav Kuzmanović

**31. Sinteza atomskih spektara u induktivno spregnutoj plazmi. Uticaj lakojonizujućih elemenata i hemijskih smetnji.**

Mentor: prof. Miroslav Kuzmanović

Opis prethodne dve (30 i 31) teme: Teme su teorijske, kandidati bi koristili program za računanje ravnotežnog sastava plazme i program za sintezu atomskih spektara. Na osnovu odabranih sintetisanih spektara kandidati bi diskutovali karakter spektara različitih elemenata u odgovarajućim spektrohemijskim izvoru, pre svega u pogledu složenosti spektara i intenziteta spektralnih linija, sa akcentom na poredjenju očekivanih granica detekcije. Takođe, kandidati bi diskutovali uticaj efekta osnove za odabrane interferente, najpre u pogledu ravnotežnog sastava plazme a zatim i na same intenzitete spektralnih linija. Za realizaciju ovih tema nije neophodno znanje programiranja.

**32. Postavka eksperimenta za elektrohemijско praćenje oksidacione grane Bray-Liebhafsky reakcije**

Mentor: prof. Dragomir Stanisavljev

**33. Ispitivanje indukcionog perioda oksidacione grane Bray-Liebhafsky reakcije**

Mentor: prof. Dragomir Stanisavljev

**34. Spektrofluorimetrijsko ispitivanje interakcija albumina i derivata 4,7-dihidroksi kumarina i aminofenola**

Mentor: prof. Jasmina Dimitrić-Marković

**35. Spektrofluorimetrijsko ispitivanje interakcija albumina i derivata 4,7-dihidroksi kumarina i metoksiaminofenola**

Mentor: prof. Jasmina Dimitrić-Marković

Prethodne dve teme (34 i 35) se odnose na eksperimentalno-teorijski rad iz oblasti fotohemije. Eksperimentalno će se ispitati mogućnost gašenja fluorescentne emisije goveđeg (humanog) serum albumina novosintetisanim derivatima kumarina, kao i kompetitivno vezivanje u prisustvu varfarina i ibuprofena. Ispitaće se tipovi gašenja fluorescencije i osnovni parametri gašenja a primenom molekuskog dokinga ispitaće se inhibitorna aktivnost navedenih jedinjenja i tipovi međumolekulskih interakcija, sa posebnim osvrtom na zavisnost jačine interakcija od broja i položaja supstituenta na sintetisanim derivatima.

### **36. Korozija cinka u fluoridnim i fosfatnim elektrolitima**

Metalni Zn se nalazi u velikom broju elektrohemijskih uređaja. Međutim, u prisustvu određenih hemijskih vrsta dolazi do njegove korozije/rastvaranja, a samim tim i do degradiranja performansi ili prestanka rada uređaja. U ovom radu bi se ispitala serija elektrolita, fluoridnih i fosfatnih, sa ciljem stabilizacije Zn elektrode i/ili smanjenja stepena korozije.

Mentor: doc. Nemanja Gavrilov

### **37. Rastvaranje i depozicija cinka iz fluoridnih i fosfatnih rastvora**

U radu ce biti ispitano rastvaranje i re-depozicija cinka tokom punjenja/praznjenja elektrohemijkih uređaja metodom ciklicne voltametrije i galvanostatnog punjenja/praznjenja u cilju ispitivanja ponasanja metalnog cinka u pomenutim elektrolitima.

Mentor: doc. Nemanja Gavrilov

### **38. Kapacitet ugljeničnih materijala u superkondenzatorima sa alkalnim elektrolitom**

Razlicite vrste ugljenicnih materijala, zbog svoje strukture, specificne površine i provodljivosti, su pogodni za upotrebu u superkondezatorima. U ovom radu ce biti ispitane kapacitivne karakteristike ovih materijala matodom ciklicne voltametrije.

Mentor: doc. Nemanja Gavrilov

### **39. Spektroskopska i hromatografska analiza bromazepama**

Mentori: v.prof. Biljana Šljukić Paunković, asist. Dušan Dimić