

НАСТАВНО-НАУЧНОМ ВЕЋУ

Предмет: Реферат о урађеној докторској дисертацији кандидата **Анђеле Р. Симовић**, мастер инжењера технологије

Одлуком бр. **35/41** од **14.3.2024.** године, именовани смо за чланове Комисије за преглед, оцену и одбрану докторске дисертације кандидата Анђеле Р. Симовић, под насловом

Инхибиторско дејство деривата органских киселина и екстраката биљака као еколошки прихватљивих инхибитора корозије метала

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

9.12.2021. године – Кандидат Анђела Р. Симовић, мастер инжењер технологије, предложила је тему докторске дисертације под називом: „Инхибиторско дејство деривата органских киселина и екстраката биљака као еколошки прихватљивих инхибитора корозије метала” (одлука бр. 21/29).

23.12.2021. године године – На седници Наставно – научног већа Технолошко – металуршког факултета донета је Одлука број бр. 35/364 о именовању Комисије за оцену подобности теме и кандидата Анђеле Р. Симовић, мастер инжењера технологије, за израду докторске дисертације под називом: „Инхибиторско дејство деривата органских киселина и екстраката биљака као еколошки прихватљивих инхибитора корозије метала”.

3.2.2022. године – На седници Наставно – научног већа Технолошко – металуршког факултета донета је Одлука број 35/24 о прихватању Реферата Комисије за оцену подобности теме и кандидата и одобравању израде докторске дисертације Анђеле Р. Симовић, мастер инжењера технологије, под називом: „Инхибиторско дејство деривата органских киселина и екстраката биљака као еколошки прихватљивих инхибитора корозије метала”, а за ментора ове докторске дисертације је именована др Јелена Бајат, редовни професор Технолошко – металуршког факултета Универзитета у Београду.

14.2.2022. године – На седници Већа научних области техничких наука Универзитета у Београду дата је сагласност на предлог теме докторске дисертације Анђеле Р. Симовић, мастер инжењера технологије, под називом: „Инхибиторско дејство деривата органских

киселина и екстраката биљака као еколошки прихватљивих инхибитора корозије метала”, Одлука број 61206-517/2-22.

14.3.2024. године – На седници Наставно – научног већа Технолошко – металуршког факултета донета је Одлука број 35/41 о именовању чланова комисије за оцену докторске дисертације Анђеле Р. Симовић, мастер инжењера технологије, под називом: „Инхибиторско дејство деривата органских киселина и екстраката биљака као еколошки прихватљивих инхибитора корозије метала” у саставу др Бранимир Гргур, редовни професор, Технолошко-металуршког факултета Универзитета у Београду, др Милица Гвозденовић, редовни професор Технолошко-металуршког факултета Универзитета у Београду, др Јелица Новаковић, научни сарадник Универзитета у Београду, Биолошки факултет, др Бојана Радојковић, виши научни сарадник Универзитета у Београду, Институт за хемију, технологију и металургију, Институт од националног значаја за Републику Србију и др Боре Јегдић, научни саветник Универзитета у Београду, Институт за хемију, технологију и металургију, Институт од националног значаја за Републику Србију.

Кандидат Анђела Р. Симовић, уписала је докторске академске студије на Технолошко – металуршком факултету Универзитета у Београду, смер Хемијско инжењерство, школске 2017/2018. године.

1.2. Научна област дисертације

Истраживања у оквиру ове докторске дисертације припадају научној области Технолошко инжењерство, ужа област Хемијско инжењерство, за коју је матичан Технолошко – металуршки факултет Универзитета у Београду. Ментор, др Јелена Бајат, редовни професор Технолошко – металуршког факултета Универзитета у Београду, чија је компетенција за вођење докторске дисертације потврђена на основу искуства, ментор је две одбрањене докторске дисертације и 89 објављених публикација из области којој дисертација припада.

1.3. Биографски подаци о кандидату

Анђела Р. Симовић рођена је 17. 04. 1991. године у Никшићу где је завршила основну школу и гимназију. Основне студије на Металуршко-технолошком факултету у Подгорици Универзитета у Црној Гори, студијски програм Хемијска технологија, уписала је школске 2010/11. године, а дипломирала у септембру 2014. године. Мастер студије на Технолошко-металуршком факултету Универзитета у Београду, студијски програм Хемијско инжењерство, уписала је школске 2014/15. године, а завршила у мају 2017. године. Докторске академске студије уписала је школске 2017/18. године на Технолошко-металуршком факултету Универзитета у Београду, на студијском програму Хемијско инжењерство, под менторством др Јелене Бајат, редовног професора Технолошко-металуршког факултета, Универзитета у Београду. Положила је све испите предвиђене планом и програмом на докторским студијама са просечном оценом 10,00.

2014/2015 године је одрадила приправнички стаж као наставник хемије у основној школи у Никшићу и положила стручни и државни испит. 2016/2017 је радила као професор хемије у две средње школе у Никшићу. Од августа 2019. године је била запослена на Иновационом центру Технолошко-металуршког факултета у Београду. Од марта 2023. године је запослена на Институту за хемију, технологију и металургију – Институт од националног значаја за Републику Србију.

Од 2019. године је ангажована на националном пројекту под називом: „Синтеза, развој технологија добијања и примена наноструктурних мултифункционалних материјала дефинисаних својстава” (број уговора III 45019, руководилац пројекта проф. Ђорђе

Јанаћковић), финансираног од Министарства образовања, науке и технолошког развоја Републике Србије.

Аутор је и коаутор осам радова категорије M20, једанаест саопштења на међународним научним скуповима и пет на националним. Члан је Српског хемијског друштва и Међународног друштва електрохемије. Учествовала је у изради три завршна рада.

2. ОПИС ДИСЕРТАЦИЈЕ

2.1. Садржај дисертације

Докторска дисертација Анђеле Р. Симовић, мастер инжењера технологије под називом „**Инхибиторско дејство деривата органских киселина и екстраката биљака као еколошки прихватљивих инхибитора корозије метала**” је написана на 144 стране у оквиру којих се налазе 84 слике, 25 табела и 419 литературних навода. Докторска дисертација садржи шест целина: Увод, Теоријски део тезе, Експериментални део, Резултате и дискусију, Закључак и Литературу. Поред овога дисертација садржи и Биографију кандидата, као и прилоге са Изјавама о ауторству, о истоветности штампане и електронске верзије докторског рада, о коришћењу, и Оцену извештаја о провери оригиналности докторске дисертације. Дисертација такође садржи и сажетак на српском и на енглеском језику. Наведена докторска дисертација по свом облику и садржају испуњава прописе и стандарде за докторске дисертације које се бране на Универзитету у Београду.

2.2. Кратак приказ појединачних поглавља

У *Уводном делу*, који је прво поглавље дисертације, дефинисан је појам корозије, зависност брзине корозије од врсте метала и од околне средине. Наведене су различите последице које ова природна појава носи са собом од којих се највише истичу економске и сигурносне. Истакнут је значај спречавања корозије и методе којима се брзина корозије може смањити, са нагласком на употребу инхибитора корозије као најидеалније и најисплативије стратегије за заштиту. Дефинисане су врсте корозије са посебним освртом на електрохемијску корозију и њену подјелу.

Теоријски део подељен је у четири подпоглавља. У првом подпоглављу, *Инхибитори корозије*, дат је увид у сам појам инхибитора корозије, детаљно су описани услови које треба да испуњава неко једињење да би било прихватљив инхибитор, као и од чега зависи ефикасност инхибиције. Дефинисане су могућности поделе инхибитора корозије са посебним акцентом на поделу у зависности од механизма дјеловања на електрохемијски процес (анодни, катодни и мешовити инхибитори). У другом подпоглављу, *Механизми деловања инхибитора у скоро неутралним срединама*, описани су начини спречавања одигравања електрохемијске корозије у неутралним растворима, односно начини смањења брзине растварања метала на аноди и редукције раствореног кисеоника на катоди. У овом поглављу се описују две доминантне групе инхибитора које делују у скоро неутралним условима, а то су инхибитори који формирају баријерне заштитне филмове таложењем или хемијском реакцијом и инхибитори који се зову пасивациони инхибитори. Дефинисана је пасивност метала са освртом на утицај концентрације инхибиторских и агресивних ањона, природе површине метала, температуре, рН и концентрације раствореног кисеоника на стабилност пасивног стања метала. Такође, детаљно су објашњени механизми заштите, тј. сви могући начини којим инхибиторски ањони утичу на очување и формирање пасивних филмова на металима. У трећем подпоглављу, *Механизми деловања инхибитора у киселим срединама*, детаљно су описани начини спречавања одигравања електрохемијске корозије у киселим растворима, односно начини смањења брзине растварања метала на аноди и издвајања молекула водоника на катоди. У овом поглављу дат је и детаљан увид у

адсорпцију инхибитора и различитих врста адсорпције, улогу самог метала и његовог површинског наелектрисања у инхибицији корозије. Описан је утицај молекулске структуре и функционалних група инхибитора на адсорпцију и заштиту од корозије. Дат је и увид у интеракције које остварују молекули инхибитора са молекулима воде, као и у интеракције између адсорбованих инхибиторских врста на металу и на реакције редукције адсорбованих инхибитора. Такође, објашњени су начини на које кисели инхибитори могу утицати на анодне и катодне реакције корозије. У четвртом подпоглављу, *Зелени инхибитори корозије*, су приказани најрелевантнији и најновији литературни подаци везани за природне супстанце које се испитују у циљу замене штетних, токсичних и канцерогених органских и неорганских комерцијалних једињења. Зелени инхибитори су биоразградива, еколошки прихватљива једињења, која не садрже тешке метале и друга отровна и штетна једињења, обновљива су, безбедна и имају биокомпатибилност у природи. У овом поглављу је дефинисана њихова подела, као и карактеристике зелених инхибитора на бази биљака (екстракти и уља), аминокиселина и њихових једињења и различитих супстанци на бази лантаноида.

Експериментални део је подељен у два додпоглавља. У првом су детаљно су описане хемикалије које су коришћене као инхибитори корозије за киселе и неутралне средине, као и метали на којима су вршена испитивања (угљенични челик и легура алуминијума AA2024). Приказана је синтеза етарских уља црног бора и Панчићеве оморице. Поред етарских уља извршена је синтеза и органско-неорганских комплекса лантаноид-тиогликолат употребом неорганских соли лантаноида и натријум-тиогликолата. Остали инхибитори су тестирани у облику у ком су испоручени од добављача. У другом подпоглављу су детаљно описане методе карактеризације синтетисаних једињења. Ефикасност свих инхибитора је процењена електрохемијским методама, а описане су и површинске и теоријске методе помоћу којих је добијен увид у начин инхибиције корозије.

Резултати и дискусија су груписани у две тематске целине:

- **Органски зелени инхибитори на бази биљака и фитохемикалија за инхибицију корозије угљеничног челика у киселој средини**
- **Неорганско-органски зелени инхибитори на бази лантаноида и органских киселина за инхибицију корозије легуре AA2024 у неутралној средини**

У оквиру прве тематске целине обрађена су три наслова:

1. *Етарско уље црног бора и фитохемикалије као зелени инхибитори корозије угљеничног челика*

Овај наслов обухвата седам подналова: 1) Одређивање састава етарског уља црног бора и карактеризација; 2) Резултати мерења потенцијала отвореног кола челика са и без додатка етарског уља црног бора; 3) Резултати импеданских мерења челика са и без додатка етарског уља црног бора; 4) Резултати поларизационих мерења челика са и без додатка етарског уља црног бора; 5) Угао квашења челика са и без додатка етарског уља црног бора; 6) Резултати импеданских мерења челика са и без додатка етарског уља црног бора и његових фитохемикалија; 7) Резултати поларизационих мерења челика са и без додатка етарског уља црног бора и његових фитохемикалија.

2. *Етарско уље Панчићеве оморице као зелени инхибитор корозије угљеничног челика*

Овај наслов обухвата осам подналова: 1) Одређивање састава етарског уља Панчићеве оморице и карактеризација; 2) Резултати импеданских мерења челика са и без додатка етарског уља Панчићеве оморице; 3) Резултати поларизационих мерења челика са и без додатка етарског уља Панчићеве оморице; 4) SEM анализа челика са и без додатка етарског уља Панчићеве оморице; 5) Адсорпциона изотерма и XPS анализа челика са додатком етарског уља Панчићеве оморице; 6) Угао квашења челика са и без додатка етарског уља Панчићеве оморице; 7) Интеракција између инхибитора и површине гвожђа; 8) Покретљивост адсорбованог инхибитора на површини Fe(110).

3. *Зелени инхибитори корозије челика на бази пептида и њихових градивних јединица*

Овај наслов обухвата пет подналова: 1) Резултати импеданских мерења челика са и без додатка инхибитора на бази аминокиселина; 2) Резултати поларизационих мерења челика са

и без додатка инхибитора на бази аминокиселина; 3) Карактеристике површине (морфологија и топографија) челика са и без додатка инхибитора на бази аминокиселина; 4) XPS анализа челика са додатком инхибитора глутатиона (Glt); 5) Теоријски прорачуни.

У оквиру друге тематске целине обрађена су два наслова:

1. Синергија церијумових и лактатних јона као зелена смеша за инхибицију корозије легуре алуминијума AA2024

Овај наслов обухвата пет поднаслова: 1) Резултати импеданских мерења легуре алуминијума AA2024 са и без додатка инхибитора CeCl_3 и Се-лактата; 2) Резултати поларизационих мерења легуре алуминијума AA2024 са и без додатка инхибитора CeCl_3 и Се-лактата; 3) SEM/EDS анализа легуре алуминијума AA2024 са и без додатка инхибитора CeCl_3 и Се-лактата; 4) XPS анализа легуре алуминијума AA2024 са додатком инхибитора Се-лактата; 5) Механизам синергије између Ce^{3+} и органских лактатних ајона.

2. Комплекси лантаноид-тиогликолат као бифункционални инхибитори корозије легуре алуминијума AA2024

Овај наслов обухвата девет поднаслова: 1) Карактеризација комплекса PE-тиог; 2) Резултати импеданских мерења легуре алуминијума AA2024 са и без додатка инхибитора PE-тиог; 3) Резултати поларизационих мерења легуре алуминијума AA2024 са и без додатка инхибитора PE-тиог; 4) ATR-FTIR анализа PE-тиог филмова скинутих са површине легуре алуминијума AA2024; 5) SEM/EDS анализа легуре алуминијума AA2024 са и без додатка инхибитора Nd-тиог; 6) XPS анализа легуре алуминијума AA2024 са додатком инхибитора Се-тиог; 7) Електронска структура PE-тиог комплекса; 8) Ефекти хидратације; 9) Механизам деловања PE-тиог.

У поглављу **Закључак** су сумирани најзначајнији резултати и сазнања проистекла из ове докторске дисертације.

У поглављу **Литература** наведен је списак свих референци цитираних у докторској дисертацији.

3. ОЦЕНА ДИСЕРТАЦИЈЕ

3.1. Савременост и оригиналност

Одговарајућа контрола корозије је од великог значаја будући да су студије показале да проузрокује економске губитке и до неколико милијарди долара на глобалном нивоу. Са ове тачке гледишта смањење стопе корозије је неопходно, међутим начини њеног заустављања/успоравања могу бити опасни по биосферу Земље и све живе организме. Неорганска једињења, као што су хромати, делују као добри инхибитори корозије, али су изузетно канцерогени и опасни. Такође, већина синтетичких органских једињења, поред скувих, сложених и токсичних путева синтезе, високо је штетна по људско здравље, као и по безбедност животне средине. Ова једињења се не разграђују и присутна су у различитим деловима екосистема због чега је њихова употреба ограничена или строго забрањена.

Фокус модерних истраживања је потрага за еколошки прихватљивим, одрживим и јефтиним инхибиторима који могу да парирају по ефикасности токсичним, комерцијалним супстанцама које се користе у процесима киселог чишћења челика у индустријама. У овој докторској дисертацији, по први пут, испитивани су инхибитори на бази етеричних уља Панчићеве оморице и црног бора. Одабир иглица, тј. четина ове две биљке, као природног извора инхибитора корозије челика, не шкоди самој биљци јер су четинари вишегодишње врсте, са крупним стаблима и крошњама и спадају у обновљиве изворе етарских уља. Проучавање биљних уља и екстраката је у зениту популарности у области заштите од корозије, али научници указују и на неке пропусте у њиховом испитивању. Један од највећих недостатака је неадекватна идентификација и карактеризација активних молекула који се налазе у биљној смеши. Поред овога, постоји мањак релевантних података о релативној

ефикасности фитохемикалија заступљених у овим зеленим смешама. Добијањем информација о инхибиторској ефикасности састојака биљних уља и екстраката отвара се пут њиховом изоловању из биљака или производњи у лабораторији, а све то у циљу комерцијалне употребе. У овој дисертацији су по први пут електрохемијским методама испитане фитохемикалије етарског уља црног бора: α -пинен, β -пинен и кариофилен, који су састојци већине етарских уља, а у литератури нема података о њиховој појединачној активности. Упоредијена је њихова ефикасност са ефикасношћу самог уља црног бора. Такође је испитан и утицај који остварују ове три фитохемикалије у концентрацијама у којима се налазе у уљу црног бора. Активне супстанце етарског уља Панчићеве оморике: борнеол, борнил-ацетат и камфен су такође анализирани теоријским методама у циљу формирања слике о заштитном механизму, односно о начину адсорпције активних компоненти уља на површини челика. Поред ових фитохемикалија, по први пут је тестирано и упоређено дејство шест еколошки прихватљивих инхибиторских система као потенцијалних инхибитора корозије челика у 1 М раствору HCl: глицин (Gly), глутаминска киселина (Glu), цистеин (Cys), мешавина аминокиселина, тј. испитивање синергије, (Gly + Glu + Cys), мешавина цистеина са дипептидом састављеним од глицина и глутаминске киселине (Gly-Glu + Cys) и глутатион који је по природи олигопептид састављен од глицина, глутаминске киселине и цистеина. Главни допринос овог истраживања је процена утицаја хетероатома, тј. функционалних група и дужине угљоводоничног ланца на корозиону отпорност.

Укрштањем неорганских соли лантаноида и органских киселина добијени су хибридни, бифункционални инхибитори који су ефикасни у заштити легуре алуминијума AA2024 која је најподложнија питинг корозији од свих алуминијумских легура. Синергија Се-хлорида и Na-лактата на легури AA2024 у 0,1 М раствору NaCl испитана је по први пут. Ефикасност и отпорност на питинг корозију су упоређени и са Се-хлоридом, познатим неорганским, зеленим инхибитором. Синтеза PE-тиог комплекса, полазећи од неорганских соли церијума, неодијума и самаријума и Na-тиогликолата је омогућила добијање хибридни, органско-неорганских зелених инхибитора. Њихово инхибиторско дејство је такође упоређено са неорганским солима из којих су добијени. Сви тестирани инхибитори на бази лантаноида утичу на очување природног пасивног филма на површини метала. Различите анализе су омогућиле дубоки увид у механизам дејства ових неорганско-органских зелених инхибитора, који своју бифункционалност испољавају инхибицијом и анодних и катодних реакција корозије.

3.2. Осврт на референтну и коришћену литературу

Током израде докторске дисертације кандидаткиња је детаљно анализирали научну и стручну литературу из предметне области. У докторској дисертацији је дато 419 литературних навода, од којих највећи број чине радови из међународних часописа са тематиком која се обрађује у дисертацији. Највећи број навода је новијег датума, што потврђује актуелност изучаване теме у свету. Наведене референце садрже експерименталне резултате истраживања многих аутора посвећене зеленим инхибиторима корозије који показују ефикасност у киселим или неутралним срединама. У оквиру литературних навода налазе се и референце кандидаткиње Анђеле Р. Симовић, мастер инжењера технологије, проистекле из спроведених истраживања у области докторске дисертације, а које су објављене у часописима међународног значаја.

3.3. Опис и адекватност примењених научних метода

Синтеза етарских уља црног бора и Панчићеве оморике је спроведена методом хидродестилације помоћу Клевенцерове апаратуре. Лантаноид-тиогликолатни комплекси (Се-тиогликолат, Nd-тиогликолат, Sm-тиогликолат) синтетисани су према поступку из литературе. Остали инхибитори су испитивани у облику у ком су стигли од произвођача.

Састав добијених етарских уља је одређен помоћу гасне хроматографије-детекције пламене јонизације (GC-FID) и гасне хроматографије-масене спектрометрије (GC/MS). За одређивање и анализу функционалних група органских једињења присутних у етарским уљима која су тестирана као зелени инхибитори корозије у овом истраживању коришћена је инфрацрвена спектроскопија са Фуријеовом трансформацијом (FTIR). Ова метода је употребљена и за одређивање и анализу функционалних група синтетисаних лантаноид-тиогликолатних комплекса, као и за анализу адсорбованог инхибиторског филма сачињеног од лантаноид-тиогликолатних врста на површини легуре алуминијума AA2024. Енергетска дисперзиона спектроскопија X-зрака (EDS) је коришћена за одређивање хемијског састава добијених комплекса Nd-тиогликолата и Sm-тиогликолата. Метода спектроскопије електрохемијске импедансе (SEI) је коришћена ради утврђивања механизма електрохемијског растварања угљеничног челика и легуре алуминијума AA2024 у растворима без и са различитим инхибиторима, као и у сврху одређивања импеданских параметара. Поларизациона мерења су вршена у циљу испитивања утицаја свих испитиваних инхибитора на анодну и катодну реакцију корозије и ради одређивања потенцијала и густина струја корозије, као параметра брзине корозије. За анализу морфологије површине угљеничног челика у чистој 1 M HCl, као и у раствору са одређеном концентрацијом етарског уља Панчићеве оморике коришћена је метода скенирајуће електронске микроскопије (SEM). Морфологија површине легуре алуминијума AA2024 је анализирана помоћу скенирајућег електронског микроскопа, опремљеног са енергетски дисперзионом атомском спектроскопијом (SEM/EDS). Ова анализа је омогућила праћење напредовања корозије и адсорпције инхибитора Се-лактата и Nd-тиогликолата на површини легуре алуминијума AA2024. Фотоелектронска спектроскопија X-зрака (XPS) је омогућила дубљи увид у механизам инхибиторског деловања етарског уља Панчићеве оморике, глутатиона, Се-лактата и Се-тиогликолата. Помоћу ове методе одређен је састав филмова ових инхибитора на површини угљеничног челика (органички инхибитори) и легуре алуминијума AA2024 (органичко-неорганички инхибитори). Методе оптичка микроскопија и микроскопија атомске силе (AFM) су послужиле за добијање потврде о заштитним могућностима, као и о разликама у ефикасности које су добијене електрохемијским методама за инхибиторе: Gly-Glu + Cys, Gly + Glu + Cys i Glt. Хидрофилна својства узорака угљеничног челика у чистој киселој средини, као и промена хидрофилних својстава са временом код узорака са одређеним концентрацијама етарских уља црног бора и Панчићеве оморике анализирана су методом одређивања угла квашења. Ради утврђивања начина везивања изабраних доминантних компоненти етарског уља Панчићеве оморике и деривата аминокиселина за супстрат гвожђа, као и ради оптимизације структуре лантаноид-тиогликолатних комплекса и дубљег увида у механизам инхибиторског дејства на површини легуре алуминијума AA204 коришћене су теоријске методе засноване на молекулској динамици и теорији функционала густине (DFT-MD).

3.4. Применљивост остварених резултата

На основу увида у до сада објављене резултате истраживања као и резултате приказане у оквиру ове докторске дисертације, може се закључити да је остварен значајан научни допринос у области заштите метала од корозије употребом еколошки прихватљивих инхибитора. У дисертацији су дефинисани параметри за добијање нових, еколошки прихватљивих инхибитора, чијом применом се постиже висока ефикасност инхибиције корозије од преко 90%. Добијени резултати доприносе проширењу фундаменталних сазнања у оквиру дате проблематике.

Развијени природни инхибитори на бази етеричних уља четинара, црног бора и Панчићеве оморике, као и фитохемикалија, аминокиселина и њихових деривата имају висок потенцијал за примену у свим индустријама у којима се спроводи кисело чишћење челика. Резултати добијени испитивањем синтетисаних бифункционалних, хибридних неорганичко-органичких инхибитора на бази лантаноида, лактата и тиогликолата упућују на могућност

њихове успешне примене у процесима зелене заштите легуре алуминијума AA2024, посебно у авио индустрији у којој се још увек користе токсични хромати. Поред наведеног, повезивање експериментално добијених резултата са теоријским прорачунима допринело је бољем увиду у механизам заштите, што даље олакшава процес развоја и дизајна нових зелених инхибитора.

3.5. Оцена достигнутих способности кандидата за самостални научни рад

Кандидаткиња Анђела Симовић, мастер инжењер технологије, показала је потребну мотивацију и способност за бављење научно–истраживачким радом, испољавајући током израде докторске дисертације велику одговорност, самосталност и стручност у претраживању и критичкој анализи научне литературе, у осмишљавању, припреми и извођењу експеримента, као и у обради и дискусији добијених експерименталних података и резултата и писању публикација. Током рада на докторату овладала је неопходним експерименталним техникама. На основу досадашњег рада, Комисија је утврдила да кандидаткиња поседује способности за самостални научно–истраживачки рад.

4. ОСТВАРЕНИ НАУЧНИ ДОПРИНОС

4.1. Приказ остварених научних доприноса

Научни доприноси резултата истраживања ове докторске дисертације су:

- Синтеза и испитивање нових органских зелених инхибитора корозије угљеничног челика за процес киселог чишћења у индустријама
- Карактеризација добијених етарских уља
- Утврђивање оптималних радних концентрација, времена инхибиције и ефикасности за све киселе тестиране инхибиторе у 1 М HCl средини, као и њиховог утицаја на анодну и катодну реакцију корозије
- Одређивање утицаја киселих органских инхибитора на бази етарских уља и доприноса фитохемикалија на ефикасност инхибиције, као и одређивање утицаја молекулске структуре доминантних фитохемикалија у етарским уљима на ефикасност инхибиције
- Утврђивање доприноса аминокиселина и њихових спојева (деривата и синергије) као инхибитора корозије и утицаја дужине угљоводоничног ланца, као и значаја броја и врсте функционалних група код инхибитора на бази аминокиселина
- Карактеризација органских филмова на угљеничном челику и дефинисање механизма инхибиције
- Синтеза нових, хибридних и бифункционалних зелених инхибитора корозије легуре алуминијума AA2024 у неутралној средини са циљем одређивања њиховог утицаја на брзину корозије и постојаност пасивног филма
- Дефинисање врсте инхибитора на основу утицаја на парцијалне реакције корозије и потврда бифункционалности и одређивање оптималне концентрације инхибитора и ефикасности у функцији времена инхибиције
- Одређивање утицаја врсте катјона лантаноида на ефикасност инхибиције и испитивање отпорности на питинг и општу корозију
- Дефинисање морфологије и карактеризација хетерогених неорганско-органских филмова на површини легуре алуминијума AA2024
- По први пут је показана могућност примене бифункционалних инхибитора на бази неорганских соли лантаноида и органских киселина лактата и тиогликолата
- По први пут је испитивана инхибиторска ефикасност фитохемикалија као и самих етарских уља Панчићеве оморике и црног бора

- По први пут је дефинисан утицај хетероатома, тј. функционалних група и дужине угљоводоничног ланца аминокиселина (Gly, Glu, Cys) и њиховог синергетског дејства као и њихових деривата на корозиону отпорност челика

4.2. Критичка анализа резултата истраживања

Истраживања у оквиру ове докторске дисертације су осмишљена на основу детаљне анализе литературе и јасно дефинисаних циљева из области корозије и заштите. Приказана истраживања, на основу доступне литературе, представљају унапређење научних знања на пољу зелених инхибитора корозије. У овој докторској дисертацији приказани су резултати испитивања еколошки прихватљивих инхибитора корозије угљеничног челика и легуре алуминијума AA2024. Увидом у доступну литературу може се закључити да су природни инхибитори на бази етеричних уља четинара, црног бора и Панчићеве оморике, фитохемикалија, аминокиселина и њихових деривата, као и хибридних неорганско-органичних инхибитора на бази лантаноида, лактата и тиогликолата по први пут испитиване. Кисели и неутрални зелени инхибитори, тестирани у овој дисертацији, су показали велику ефикасност, од преко 90%, а самим тим и постали конкурентни. На основу анализе детаљно обрађених резултата, добијених помоћу савремених метода, утврђени су механизми којима се инхибитори везују за површине тестираних метала. Теоријски прорачуни су показали које се фитохемикалије етеричног уља Панчићеве оморике везују за површину челика хемисорпцијом, а које се физисорбују, што пружа могућност њиховог изоловања из биљака ради добијања ефикаснијих инхибитора, као и синтезе у лабораторији. Овакви прорачуни су показали и да се најјача веза са гвожђем остварује преко атома сумпора у глутатиону (Glt) и цистеину (Cys).

Треба нагласити да одређивањем механизма на основу структура инхибитора и врсте метала постоји простор за даљу надоградњу и унапређење испитиваних група зелених инхибитора. Ова докторска дисертација садржи научне резултате који представљају важан помак ка даљем развоју и практичној примени испитиваних зелених инхибитора.

4.3. Верификација научних доприноса

Кандидаткиња Анђела Симовић је резултате свог истраживања током израде ове дисертације потврдила објављивањем радова у часописима међународног значаја и саопштењима на научним скуповима међународног и националног значаја. Из ове докторске дисертације проистекли су следећи резултати:

Рад у истакнутом међународном часопису (M22)

1. **A.R. Simović**, B.M. Radojković, B.V. Jegdić, M. Milojević, J.B. Bajat, “Cerium lactate as green corrosion inhibitor of AA2024 alloy”, *Materials and Corrosion*. 74 (2023) 1371-1381. (IF(2022)=1.8), (ISSN 0947-5117), <https://doi.org/10.1002/maco.202313882>
2. **A.R. Simović**, B.N. Grgur, J. Novaković, P. Janačković, J. Bajat, “Black Pine (Pinus nigra) Essential Oil as a Green Corrosion Inhibitor for Carbon Steel”, *Metals*. 13 (2023) 508. (IF(2022)=2.9) <https://doi.org/10.3390/met13030508>

Рад у међународном часопису (M23)

1. **A. Simović**, · S. Stevanović, · B. Milovanović, · M. Etinski, · J. B. Bajat., “ Green corrosion inhibitors of steel based on peptides and their constituents: a combination of experimental and computational approach” *Journal of Solid State Electrochemistry*. 27 (2023) 1821-1834. (IF(2022)=2.5), (ISSN 1433-0768), <https://doi.org/10.1007/s10008-023-05433-w>

Саопштење са међународног скупа штампано у изводу (M34)

1. **Andela R. Simović**, Jelica Novaković, Peđa Janačković, Jelena Bajat, Pinus Sylvestris essential oil as a green corrosion inhibitor for mild steel in 1 M HCl solution, International Conference on Biochemical Engineering and Biotechnology for Young Scientists, Belgrade, Serbia, Decembar 07-08, 2023, Book of Abstracts, p. 43
2. **Andela Simović**, Branislav Milovanović, Mihajlo Etinski, Luka Matović, Jelena B. Bajat, A combined electrochemical and theoretical analysis of AA2024 alloy surface protected by RE- thioglycolate complex inhibitors, 74th Annual Meeting of the International Society of Electrochemistry, Lion, France, Septembar 3-8, 2023, Book of Abstracts, S07-P-002, p.002.
3. **A. Simović**, J. Bajat, Pinus Nigra Essential Oil and Its Main Active Components as Sustainable Compounds for Mitigation of Carbon Steel Corrosion, 26th Congress of the Society of Chemists and Technologists of Macedonia (SCTM), Ohrid, Severna Makedonija, September 20-23, 2023, Book of Abstracts, PSSE P-10, p. 135

Саопштење са скупа националног значаја штампано у изводу (M64):

1. **Andela R. Simović**, Bojana M. Radojković, Bore V. Jegdić, Milica Milojević, Jelena B. Bajat, Cerium lactate as green corrosion inhibitor of AA2024 alloy, 59th Meeting of the Serbian Chemical Society, Novi Sad, Serbia, June 1-2, 2023, Book of Abstracts, EH-6, p. 75.
2. **Andela R. Simović**, Sanja Stevanović, Branislav Milovanović, Mihajlo Etinski, Jelena B. Bajat, Peptides and their constituents as steel corrosion inhibitors: an experimental and theoretical approach, 59th Meeting of the Serbian Chemical Society, Novi Sad, Serbia, June 1-2, 2023, Book of Abstracts, EH-6, p. 63.
3. **Andela R. Simović**, Jelica Novaković, Peđa Janačković, Jovanka N. Kovačina, Jelena Bajat, Picea omorika essential oil as a green corrosion inhibitor for mild steel in 1M HCl solution, 58th Meeting of the Serbian Chemical Society, Beograd, Serbia, June 9-10, 2022, Book of Abstracts, EH-6, p. 75.
4. **Andela Simović**, Aleksandar Marinković, Jelena Bajat, Amino acids as green corrosion inhibitors for AA2024-T42, 57th Meeting of the Serbian Chemical Society, Kragujevac, Serbia, June 18-19 2021, (Online), Book of Abstracts, EH-P-3, p. 40.

5. ПРОВЕРА ОРИГИНАЛНОСТИ ДОКТОРСКЕ ДИСЕРТАЦИЈЕ

На основу Правилника о поступку провере оригиналности докторских дисертација које се бране на Универзитету у Београду, коришћењем програма iThenticate извршена је провера оригиналности докторске дисертације кандидаткиње Анђеле Р. Симовић, мастер инжењера технологије, под називом „Инхибиторско дејство деривата органских киселина и екстраката биљака као еколошки прихватљивих инхибитора корозије метала”. Извештај који садржи резултате провере оригиналности ментор је добио дана 14.03.2024. Утврђени проценат подударности је 2 %. Овај проценат је последица употребе стручних термина и назива коришћених метода и њихових скраћеница и инструмената који се налазе у наведеној тези. На основу свега изнетог, а у складу са чланом 8. став 2. Правилника о поступку провере оригиналности докторских дисертација које се бране на Универзитету у Београду, изјављујемо да извештај указује на оригиналност докторске дисертације, те се прописани поступак припреме за њену одбрану може наставити (позитивна оцена).

6. ЗАКЉУЧАК И ПРЕДЛОГ

На основу свега наведеног Комисија сматра да докторска дисертација Анђеле Р. Симовић, мастер инжењера технологије, под називом „Инхибиторско дејство деривата органских киселина и екстракта биљака као еколошки прихватљивих инхибитора корозије метала” представља значајан и оригинални научни допринос у области Технолошког инжењерства, што је потврђено објављивањем радова у релевантним часописима међународног значаја. Предмет и циљеви који су постављени су јасно наведени и у потпуности остварени. Комисија сматра да ова докторска дисертација испуњава све захтеване критеријуме као и да је кандидат током израде дисертације показао научно-истраживачку способност у свим фазама израде дисертације.

Имајући у виду квалитет, обим и научни допринос постигнутих и приказаних резултата, Комисија предлаже Наставно–научном већу Технолошко–металуршког факултета Универзитета у Београду да прихвати овај Реферат, пружи на увид јавности поднету докторску дисертацију под називом „Инхибиторско дејство деривата органских киселина и екстракта биљака као еколошки прихватљивих инхибитора корозије метала” кандидаткиње Анђеле Р. Симовић, мастер инжењера технологије, у законом предвиђеном року, као и да Реферат упути Већу научних области техничких наука Универзитета у Београду и да након завршетка процедуре позове кандидата на усмену одбрану дисертације пред Комисијом у истом саставу.

У Београду, 29.03.2024.

ЧЛАНОВИ КОМИСИЈЕ

Др Бранимир Гргур, редовни професор
Универзитета у Београду, Технолошко-металуршки факултет

Др Милица Гвозденовић, редовни професор
Универзитета у Београду, Технолошко-металуршки факултет

Др Јелица Новаковић, научни сарадник
Универзитета у Београду, Биолошки факултет

Др Бојана Радојковић, виши научни сарадник
Универзитета у Београду, Институт за хемију, технологију и металургију,
Институт од националног значаја за Републику Србију

Др Боре Јегдић, научни саветник
Универзитета у Београду, Институт за хемију, технологију и металургију,
Институт од националног значаја за Републику Србију