

УНИВЕРЗИТЕТ У БЕОГРАДУ – ХЕМИЈСКИ ФАКУЛТЕТ
НАСТАВНО – НАУЧНОМ ВЕЋУ

Предмет: Пријава теме докторске дисертације Катарине Д. Стојановић, мастер хемичара, студента Хемијског факултета

Молим Наставно-научно веће Универзитета у Београду, Хемијског факултета, да одобри израду докторске дисертације из области хемије под насловом:

„Експериментална анализа и моделовање електрохемијске оксидације бисфенола А – ефикасност, еколошки утицај и економска изводљивост процеса“

За оцену научне заснованости предложене теме докторске дисертације предлажем Комисију у следећем саставу:

1. Др Дубравка Релић, ванредни професор, Универзитет у Београду, Хемијски факултет (ментор);
2. Др Марија Јечменица Дучић, научни сарадник, Универзитет у Београду, Институт за нуклеарне науке „Винча“, Институт од националног значаја за Републику Србију (ментор);
3. Др Александар Поповић, редовни професор, Универзитет у Београду, Хемијски факултет.

Уз молбу прилажем:

1. Биографију
2. Библиографију
3. Изјаву да предложена тема није пријављена на другој високошколској установи у земљи и иностранству
4. Образложење теме

У Београду,
28.11.2025.

Катарина Стојановић

Истраживач приправник

Универзитет у Београду, Институт за нуклеарне науке „Винча“
Институт од националног значаја за Републику Србију

Биографски подаци кандидата

Катарина Д. Стојановић рођена је 04.08.1999. године у Београду. Основну школу је завршила 2014. године, а Гимназију у Чачку је завршила 2018. године. Основне академске студије Универзитета у Београду – Хемијског факултета, студијски програм Хемија животне средине, уписала је 2018. године. Завршни рад под насловом „*In vitro* процена биорасположивости елемената симулацијом флуида плућа упоређивањем Хачовог и вештачког интерстицијалног флуида“ одбранила је 2022. године на Катедри за примењену хемију Хемијског факултета. Основне академске студије Универзитета у Београду – Хемијског факултета, завршила је са просечном оценом 8,68 (осам и 68/100) и оценом 10 на завршном раду. Мастер академске студије Универзитета у Београду – Хемијског факултета, студијски програм Хемија животне средине, уписала је 2022. године. Завршни рад под насловом „Процена биорасположивости потенцијално токсичних елемената из виноградарског земљишта помоћу симулираних флуида плућа“ одбранила је 2023. године на Катедри за примењену хемију Хемијског факултета. Мастер академске студије завршила је са просечном оценом 10,00 (десет и 00/100) и оценом 10 на завршном раду. Докторске академске студије Универзитета у Београду – Хемијског факултета уписала је 2023. године на Катедри за примењену хемију. До сада је положила све испите предвиђене планом и програмом за прву и другу годину докторских академских студија, студијског програма Хемија.

Од јануара 2024. године Катарина Стојановић је запослена као истраживач приправник у Лабораторији за физичку хемију (050) у Институту за нуклеарне науке „Винча“ – Институту од националног значаја за Републику Србију и ангажована на истраживачкој теми под називом „Уклањање загађујућих супстанци из животне средине“. Током 2024. године била је учесник пројекта „Пити или не пити?“, који је финансирао Центар за промоцију науке, а чији је руководилац била др Данка Аћимовић. Као стипендиста Фондације „Доц. др Милена Далмација“ похађала је Школу за заштиту животне средине „КВАЛИТЕТ ВОДА“ – Water Workshop 2024 коју организује Природно-математички факултет Универзитета у Новом Саду. Такође 2024. године, са иновативном идејом „Lab Aid“ усмереној ка побољшању лабораторијског рада и подршци истраживачима, учествовала је на такмичењу стартап тимова у организацији Иновационог инкубатора Хемијског факултета, Универзитета у Београду, и Научно-технолошког парка Нови Сад. У првом кругу такмичења са својим тимом је освојила прво место, док је у другом кругу такмичења освојила друго место. Катарина Стојановић је учествовала на тринаест међународних конференција у земљи и иностранству, а 2025. године била је и члан организационог одбора међународне конференције ICCE2025 (19th International Conference on Chemistry and the Environment) одржане у Београду.

Кандидаткиња Катарина Стојановић бави се научноистраживачким радом у области хемије животне средине, који има за циљ испитивање, развој и примену процеса електрохемијске оксидације за пречишћавање отпадних вода богатих различитим органским загађујућим супстанцама. Поред експерименталног, истраживачки рад кандидаткиње обухвата математичко моделовање електрохемијске оксидације, као и прорачуне са циљем процене утицаја на животну средину и економске изводљивости процеса, што подразумева примену разних софтверских пакета и алата.

Објављени научни радови и саопштења

Кандидаткиња Катарина Д. Стојановић је коаутор научног рада објављеног у врхунском међународном часопису и аутор је и коаутор тринаест саопштења, од којих је девет штампано у целини на скуповима од међународног значаја, а четири саопштења су штампана у изводима на скуповима од међународног значаја.

1. Научни радови објављени у врхунским међународним часописима (M21):

T. Brdarić, D. Aćimović, B. Savić Rosić, M. Simić, **K. Stojanović**, Z. Vranješ, D. Vasić Aniđijević, Bibliometric Analysis of Nanostructured Anodes for Electro-Oxidative Wastewater Treatment, Sustainability 2024, 16(10), 3982, <https://doi.org/10.3390/su16103982>.

2. Радови саопштени на међународним скуповима штампани у целини (M33):

Simić M., Aćimović D., Savić Rosić B., Ječmenica Dučić M., **Stojanović K.**, Maksin D., Brdarić T., Kinetic Study of Degradation Bisphenol A by Fenton Process, Sokobanja, Serbia, June 18-21, 2024, ISBN 978-86-6305-152-2.

Aćimović D., **Stojanović K.**, Simić M., Savić Rosić B., Vranješ Z., Ječmenica Dučić M., Brdarić T., Detection of Bisphenol A Intermediates during Fenton Process and Prediction of Reaction Pathways, Sokobanja, Serbia, June 18-21, 2024, ISBN 978-86-6305-152-2.

Brdarić T., Aćimović D., Savić Rosić B., **Stojanović K.**, Simić M., Vranješ Z., Ječmenica Dučić M., Advanced Oxidation Processes (AOPS) for Wastewater Treatment: Bibliometric Study, Sokobanja, Serbia, June 18-21, 2024, ISBN 978-86-6305-152-2.

Simić M., Aćimović D., Kovačević M., **Stojanović K.**, Savić Rosić B., Vasić Aniđijević D., Brdarić T., Impact of Initial Concentration of H₂O₂ on BPA Degradation Efficiency by Fenton Reagent, Belgrade, Serbia, 2024, <https://doi.org/10.46793/Phys.Chem24I.077S>.

Simić M., Kovačević M., **Stojanović K.**, Ječmenica Dučić M., Vasić Aniđijević D., Brdarić T., Aćimović D., Prediction of Bisphenol A Degradation Pathways during Electrochemical Oxidation, Belgrade, Serbia 2024, <https://doi.org/10.46793/Phys.Chem24I.081S>.

Kovačević M., Simić M., Stojanović K., Aćimović D., Živković S., Brdarić T., Vasić Aniđijević D., Photocatalytic Degradation of Ciprofloxacin with Iron-Modified Titan(IV) Oxide, Belgrade, Serbia, 2024, <https://doi.org/10.46793/Phys.Chem24I.073K>.

Kovačević M., Simić M., **Stojanović K.**, Aćimović D., Živković S., Brdarić T., Vasić Aniđijević D., Photodegradation of Ciprofloxacin with Copper-Modified Titanium(IV)-Oxide, Belgrade, Serbia, 2024, <https://doi.org/10.5937/imprc25267k>.

Simić M., Kovačević M., **Stojanović K.**, Ječmenica Dučić M., Vasić Aniđijević D., Aćimović D., Brdarić T., Comparative Study of Electrochemical Degradation of Rhodamine B using Glassy

Carbon, Stainless Steel, and Nickel Electrodes, Belgrade, Serbia, 2024, <https://doi.org/10.5937/imprc25261s>.

Simić M., Kovačević M., **Stojanović K.**, Rosić Savić B., Vasić Anićijević D., Brdarić T., Aćimović D., Electrochemical Oxidation of Bisphenol S with SnO₂-MWCNT Electrodes, Belgrade, Serbia, 2024, <https://doi.org/10.5937/imprc25256s>.

3. Радови саопштени на међународним скуповима штампани у изводу (М34):

Stojanović K., Ječmenica Dučić M., Simić M., Kovačević M., Vasić Anićijević D., Brdarić T., Aćimović D., Assessing Bisphenol A Degradation via Electro-Fenton Process the role of Lactic Acid as an Indicator, Bijeljina, Bosnia and Herzegovina, 2025, ISBN 978-99955- 81-52-7.

Stojanović K., Kovačević M., Simić M., Živković S., Aćimović D., Brdarić T., Vasić Anićijević D., Photocatalytic Degradation of Amoxicillin on Titanium (IV) Oxide Modified by Copper Deposition, Bijeljina, Bosnia and Herzegovina, 2025, ISBN 978-99955-81-52-7.

Stojanović K., Simić M., Ječmenica Dučić M., Relić D., Brdarić T., Aćimović D., Electrochemical Treatment of Pharmaceutical Contaminants: Anodic Oxidation of Ibuprofen in Water, Belgrade, Serbia, 2025, ISBN 978-86- 7132-088-7.

Simić M., **Stojanović K.**, Ječmenica Dučić M., Relić D., Brdarić T., Aćimović D., Monitoring Bisphenol A Degradation in Water by Anodic Oxidation using Lactic Acid as an Indicator, Belgrade, Serbia, 2025, ISBN 978-86-7132-088-7.

ИЗЈАВА

Изјављујем да докторска дисертација под насловом:

**„Експериментална анализа и моделовање електрохемијске оксидације бисфенола А –
ефикасност, еколошки утицај и економска изводљивост процеса“**

није пријављена на другим високошколским установама у земљи или иностранству.

У Београду, 28.11.2025.

Катарина Стојановић

Истраживач приправник

Универзитет у Београду, Институт за нуклеарне науке „Винча“

Институт од националног значаја за Републику Србију

Назив теме: Експериментална анализа и моделовање електрохемијске оксидације бисфенола А – ефикасност, еколошки утицај и економска изводљивост процеса

Предмет научног истраживања

Предмет истраживања предложене докторске дисертације је развој, валидација и примена динамичког модела за предвиђање ефикасности разградње органских загађујућих супстанци као и токсичности третиране воде, и свеобухватна еколошка и економска процена процеса електрохемијске оксидације. Модел ће бити заснован на експериментално одређеној кинетици стварања хидроксил радикала ($\bullet\text{OH}$) у синтетичком моделу отпадне воде богате сулфатима током третмана у неподељеном двоелектродном електрохемијском систему.

Истраживање је осмишљено у три фазе. Прва фаза ће бити усмерена на оптимизацију електрохемијске поставке и развој прелиминарног модела коришћењем родамина Б као модела загађујуће супстанце. Друга фаза ће обухватити напредно моделовање и проучавање кинетике и механизма разградње еколошки релевантније загађујуће супстанце, бисфенола А (енг. Bisphenol - BPA). На основу утврђених механизма, динамички модел ће бити унапређен и прилагођен тако да предвиђа не само укупну ефикасност разградње, већ и профиле концентрације кључних интермедијера. Модел ће, на основу израчунатог састава реакционе смеше, предвиђати и промену релативне токсичности раствора током електрохемијске оксидације, изражену у односу на акутну токсичност бисфенола А као референтну вредност. Параметри потребни за моделовање токсиколошког профила у функцији времена, акутна токсичност бисфенола А и идентификованих интермедијера његове разградње (на пример Fathead Minnow LC50 (96 h) која представља концентрацију загађујуће супстанце која изазива 50% смртности рибе дебелоглава гавчица (лат. *Pimephales promelas*, енг. Fathead Minnow) након 96-часовне изложености у води), биће такође процењени применом одговарајућих софтверских алата. Трећа фаза ће бити посвећена свеобухватној квантитативној процени и поређењу експериментално оптимизованих система електрохемијске оксидације у погледу ефикасности разградње бисфенола А, потрошње електричне енергије, утицаја на животну средину и економске изводљивости процеса.

Основне хипотезе

Главна хипотеза овог истраживања је да је на основу експериментално одређене кинетике стварања хидроксил радикала и других реактивних кисеоничних врста, могуће развити динамички математички модел [1,2] који ће моћи поуздано да предвиди не само ефикасност разградње органских загађујућих супстанци током електрохемијске оксидације [3,4], већ и временски профил токсичности третиране воде током процеса [5].

Друга хипотеза је да материјал од ког су израђене електроде (катода и анода) има пресудан утицај не само на брзину и ефикасност разградње, већ и на механизам оксидације и самим тим на профил концентрације интермедијера и токсичност третираног раствора [6].

Трећа хипотеза је да ће свеобухватна процена техничких перформанси, еколошког утицаја и економске изводљивости процеса електрохемијске оксидације, јасно указати на повезаност и могуће компромисе између ових аспеката [7,8] и омогућити квантитативни избор система са највећим потенцијалом за индустријску примену превазилазећи критеријум заснован једино на ефикасности разградње [9,10].

Циљ истраживања и очекивани резултати

Општи циљ истраживања је развој робусног математичког модела за предвиђање ефикасности разградње органских загађујућих супстанци и свеобухватна квантитативна процена процеса електрохемијске оксидације бисфенола А. Резултати би требало да пруже нова сазнања о механизму разградње бисфенола А и да се проценом техничких, еколошких и економских аспеката процеса, дође до закључка о најпогоднијем начину будуће примене електрохемијске оксидације.

Конкретни циљеви и очекивани резултати обухватају:

- Развој и верификацију прелиминарног динамичког модела који ће успешно предвиђати профил концентрације хидроксил радикала и ефикасност разградње родамина Б у функцији јачине струје и материјала катоде.
- Напредно моделовање и проучавање механизма разградње еколошки релевантније загађујуће супстанце (BPA), које ће за резултат имати унапређени модел који предвиђа профиле концентрације интермедијера BPA и промену релативне токсичности третираног раствора. Експериментално ће се утврдити утицај материјала аноде на ефикасност и кинетику процеса, идентификовати главни интермедијери и предложити механизам разградње, а резултати експеримената послужитиће за развој и валидацију динамичког модела.
- Квантитативну процену електрохемијске оксидације анализом животног циклуса којом ће се идентификовати фазе процеса са највећим еколошким утицајем, и анализом трошкова животног циклуса која ће дати јасну економску перспективу испитиваних система.

Методе истраживања

У оквиру предложене докторске дисертације користиће се следећи експериментални поступци, методе и технике:

- Сви експерименти електрохемијске оксидације биће изведени у двоелектродном, неподељеном систему применом галваностатског режима. За електрохемијску карактеризацију и испитивање електрохемијског понашања електрода користиће се циклична волтаметрија (енг. *Cyclic Voltammetry – CV*) и волтаметрија са линеарном променом потенцијала (енг. *Linear Sweep Voltammetry – LSV*).
- За одређивање концентрације родамина Б и концентрације водоник-пероксида (H_2O_2) у раствору користиће се спектроскопија у ултраљубичастом и видљивом делу спектра (енг. *Ultraviolet-Visible Spectroscopy – UV-Vis*).
- За квалитативну и квантитативну анализу бисфенола А и његових интермедијера разградње користиће се гасни хроматограф у спрези са масеним спектрометром (енг. *Gas Chromatography-Mass Spectrometry – GC-MS*). Припрема ових узорака пре анализе подразумева примену течно-течне екстракције, којом ће се огранска једињења концентровати и бити одвојена из матрикса воденог раствора.
- Концентрација хидроксил радикала биће одређена коришћењем течне хроматографије високих перформанси (енг. *High Performance Liquid Chromatography – HPLC*).
- За одређивање степена минерализације бисфенола А израженог преко ТОС вредности, користиће се анализатор укупног органског угљеника (енг. *Total Organic Carbon – TOC*).
- Динамички модел оксидације бисфенола А, заснован на претпостављеном механизму разградње и експериментално одређеној концентрацији хидроксил радикала, биће развијен и нумерички реализован у MATLAB софтверско м пакету.
- Параметри токсичности бисфенола А и идентификованих интермедијера биће процењени применом бесплатног Т.Е.С.Т. софтвера Агенције за заштиту животне средине Сједињених Америчких Држава (енг. *Toxicity Estimation Software Tool - T.E.S.T.*). Поред концентрације хемикалије која изазива 50% смртности популације водене буве и дебелоглаве гавчице за одређено време изложености у води, тј. акутне токсичности *Daphnia Magna* LC50 (48 h) и *Fathead Minnow* LC50 (96 h) редом, софтвер предвиђа и штетне ефекте органских једињења на нормалан развој (енг. *Developmental Toxicity*) и склоност да се акумулирају у организму (енг. *Bioconcentration Factor – BCF*).
- За процену животног циклуса електрохемијских система (енг. *Life Cycle Assessment – LCA*) биће коришћен openLCA софтвер који користи методе попут ReCiPe (енг. *Realization of Circular Perspective – ReCiPe*), TRACI (*Tool for the Reduction and Assessment of Chemical and Other Environmental Impacts – TRACI*) и CML (енг. *Institute of Environmental Sciences, хол. Centrum voor Milieuwetenschappen Leiden – CML*) за прорачун различитих видова утицаја на медијуме животне средине и екосистем: глобалног загревања, закишељавања, еутрофикације, потрошње воде и природних ресурса, екотоксичности слатких

вода и токсичности по људе. Опсег анализе биће одређен на основу карактеристика бесплатне верзије софтвера.

- За процену трошкова животног циклуса (енг. *Life Cycle Costing – LCC*) користиће се софтверски пакет SuperPro Designer, који омогућава детаљну анализу економске изводљивости кроз извештаје о трошковима робе (енг. *Cost of Goods Sold – COGS*), расподели капиталних (енг. *Capital Expenditure – CAPEX*) и оперативних трошкова (енг. *Operating Expense – OPEX*), и исплативости процеса.

Литература

- [1] M.G. Shirkoohi, M.R. Karimi Estahbanati, Z. Nayernia, P. Ramin, K.V. Gernaey, P. Drogui, R.D. Tyagi, Mathematical Modeling of the Electro-Oxidation Process, in: Electro-Coagulation and Electro-Oxidation in Water and Wastewater Treatment (Eds. Patrick Drogui, R. D. Tyagi, Rao Y. Surampalli, Tian C. Zhang, Song Yan, Xiaolei Zhang), American Society of Civil Engineers, 2022: pp. 119–150. ISBN (Print): 978-0-7844-1602-0, ISBN (Online): 978-0-7844-8399-2. <https://doi.org/10.1061/9780784416020.ch5>.
- [2] E. Skolotneva, A. Kislyi, A. Klevtsova, D. Clematis, S. Mareev, M. Panizza, Mathematical modeling of the anodic oxidation of organic pollutants: a review, Environmental Chemistry Letters 22 (2024) 1521–1561. <https://doi.org/10.1007/s10311-023-01693-0>.
- [3] P. Cañizares, J. García-Gómez, J. Lobato, M.A. Rodrigo, Modeling of Wastewater Electro-oxidation Processes Part I. General Description and Application to Inactive Electrodes, Industrial and engineering chemistry research 43 (2004) 1915–1922. <https://doi.org/10.1021/ie0341294>.
- [4] J. Ding, Q. Gao, Y. Wang, G. Zhao, K. Wang, J. Jiang, J. Li, Q. Zhao, Simulation and prediction of electrooxidation removal of ammonia and its application in industrial wastewater effluent, Water Environment Research 93 (2021) 51–60. <https://doi.org/10.1002/wer.1343>.
- [5] C. Ferreira, J. Sanz, N. Villota, A. de Luis, J.I. Lombraña, Kinetic modelling for concentration and toxicity changes during the oxidation of 4-chlorophenol by UV/H₂O₂, Scientific Reports 11 (2021) 15726. <https://doi.org/10.1038/s41598-021-95083-7>.
- [6] L. Zhang, W. Peng, W. Wang, Y. Cao, G. Fan, Y. Huang, M. Qi, A comprehensive review of the electrochemical advanced oxidation processes: Detection of free radical, electrode materials and application, Journal of Environmental Chemical Engineering 12 (2024) 113778. <https://doi.org/10.1016/j.jece.2024.113778>.
- [7] Y. Sun, S. Bai, X. Wang, N. Ren, S. You, Prospective Life Cycle Assessment for the Electrochemical Oxidation Wastewater Treatment Process: From Laboratory to Industrial Scale, Environmental Science and Technology 57 (2023) 1456–1466. <https://doi.org/10.1021/acs.est.2c04185>.
- [8] V. Protsenko, Towards sustainable urea electro-oxidation: a thermodynamic and green chemistry evaluation of alternative pathways, Royal Society Open Science 12 (2025) 250156. <https://doi.org/10.1098/rsos.250156>.

- [9] R. Fu, P.-S. Zhang, Y.-X. Jiang, L. Sun, X.-H. Sun, Wastewater treatment by anodic oxidation in electrochemical advanced oxidation process: Advance in mechanism, direct and indirect oxidation detection methods, *Chemosphere* 311 (2023) 136993. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2022.136993>.
- [10] S. Feijoo, S. Estévez, M. Kamali, R. Dewil, M.T. Moreira, Scale-up modelling and life cycle assessment of electrochemical oxidation in wastewater treatment, *Chemical Engineering Journal* 455 (2023) 140627. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2022.140627>.