

Povjerenstvo za ocjenu i obranu doktorskog rada

1. prof. dr. sc. Željko Crljen
2. prof.dr.sc. Franjo Sokolić
3. doc.dr.sc. Larisa Zoranić
4. prof.dr.sc. Ivica Aviani
5. prof.dr.sc. Nives Štambuk Giljanović

FAKULTETSKOM VIJEĆU PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKOG FAKULTETA

Predmet: Izvješće Povjerenstva za ocjenu i obranu doktorskog rada

Poslijediplomski studij: Poslijediplomski sveučilišni studij Biofizike

Fakultetsko vijeće Prirodoslovno-matematičkog fakulteta na 52. sjednici dana 25. rujna 2012. godine izabralo je Stručno povjerenstvo za ocjenu doktorske disertacije: Marijane Mijaković pod naslovom: Mikroheterogenost u vodenoj otopini etanola (Microheterogeneity in the ethanol-water mixture).

Razmotrivši doktorsku disertaciju Stručno povjerenstvo podnosi

IZVJEŠĆE

Doktorska disertacija pristupnice Marijane Mijaković podijeljena je na pet poglavlja: 1. Uvod; 2. Sistem i metode; 3. Rezultati i 4. Zaključak i Diskusija, te na kraju uz Literaturu i Sažetke sadrži i dva Dodatka. Disertacija je pisana na engleskom jeziku, ima ukupno 146 stranica, tablica jedanaest (11), slika osamdeset četiri (84), ilustracija osam (8) i referenci sto trideset četiri (134).

U uvodnom poglavlju jasno su definirani cilj i problematika istraživanja, ponašanje otopine etanola u vodi. Vodene otopine alkohola pokazuju netrivialnu ovisnost o koncentraciji za niz veličina. Ovaj rad metodom molekularne dinamike istražuje kako se mijenja struktura otopine kroz koncept svojstva lokalnog nemješanja (mikroheterogenosti). Iscrpan pregled dosadašnjih istraživanja odnosi se na istraživanja alkohola, posebice etanola, najvažnijih rezultata simulacija otopina etanola, vode i njihovih mješavina, kao i rezultata istraživanja drugih otopina, koji pokazuju značajnost svojstva mikroheterogenosti. Uvod je suvremen i kritičan, budući da je i sama tema ovog doktorata u centru sadašnjeg istraživanja vodenih otopina.

U poglavlju 2 definirani su sistem, odnosno modeli koji se koriste u računalnoj simulaciji i detaljno je opisana metoda molekularne dinamike i programski paket classic DLPOLY koji se koristio u ovom radu.

Najopsežnije poglavlje Rezultati (48 stranica), podijeljeno je na osam podpoglavlja. U prvom podpoglavlju prikazani su rezultati vremenske dinamike osnovnih termodinamičkih parametara, čime se testiralo da se simulirani sustavi nalaze u stanju termodinamičke ravnoteže. Na početku

svakog podpoglavlja dan je kratki teorijski uvod i prikazani su eksperimentalni rezultati koji se mogu usporediti s izračunatim rezultatima iz simulacije. Također, kao npr. u slučaju opisa radijalne distribucijske funkcije prikazani su rezultati i za jednostavni model (Lennard-Jones potencijal). Ovakav način prezentacije omogućio je jasan opis rezultata i doprinio boljem razumijevanju diskusije istih. Prema tome, rezultati su opisani sustavno, pregledno, najčešće u obliku grafova i diskutirani na jasan i razumljiv način. Na kraju svakog podpoglavlja dana je poveznica rezultata s osnovnim ciljem doktorata. Zadnje podpoglavlje diskutira esperimentalne podatke koji se mogu povezati i interpretirati simulacijskim podacima i danim opisom.

Zadnje poglavlje obuhvaća zajedničku sliku tri režima mješanja etanola i vode, opisanu preko simulacijskih i eksperimentalnih podataka. Definirana je različita strukturna organizacija mikroheterogenosti u režimima mješanja etanola i vode. Izneseni su osnovni zaključci o ponašanju različitih modela koji su korišteni u ovom radu. U zaključku je također diskutirana problematika u odabiru prostorno-vremenske skale u simulacijama molekularne dinamike vodenih otopina. Na kraju zaključka definirani su budući koraci u nastavku ovog istraživanja. Zaključak jasno i kritično iznosi problematične točke ovog istraživanja, ali isto tako s pravom mjerom naglašava znanstvenu značajnost rezultata.

Sažetci na hrvatskom i engleskom jeziku su jasni i precizni, te obuhvaćaju najvažnije opise i zaključke ovog rada.

Literatura je izrazito iscrpna, obuhvaća kako starije članke koji predstavljaju temelj metode i teorijskih računa, tako i najnovije rezultate u području simulacije tekućina.

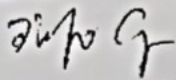
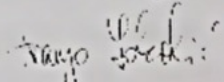
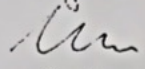
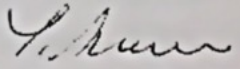
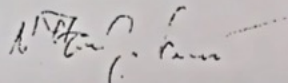
Znanstveni doprinos rada je objavljen u dva članka, dok su tri članka u pripremi.

Mišljenja smo da doktorska disertacija Marijane Mijaković zadovoljava sve potrebne uvjete, što obuhvaća izuzetno iscrpan pregled literature, jasan i kvalitetan opis rezultata istraživanja, te diskusiju značajnosti znanstvenog doprinosa u razumijevanju vodenih otopina.

Stoga predlažemo da se rad prihvati i da pristupnica može pristupiti obrani svoje doktorske disertacije.

U Splitu, 23. listopada 2012.

Stručno povjerenstvo:

1. 
2. 
3. 
4. 
5. 



Klasa:643-02/12-13/0001
Ur.broj:2181-204-03-02-12-0010
Split, 24. listopada 2012. god.

Na temelju odredaba Zakona o znanstvenoj djelatnosti i visokom obrazovanju, Statuta Prirodoslovno – matematičkog fakulteta, te prijedloga Povjerenstva za ocjenu i obranu doktorskog rada u sastavu: prof.dr.sc. Željko Crljen, prof.dr.sc. Franjo Sokolić, doc.dr.sc. Larisa Zoranić, prof.dr.sc. Ivica Aviani i prof.dr.sc. Nives Štambuk Giljanović, Fakultetsko vijeće Prirodoslovno-matematičkog fakulteta na 53. sjednici održanoj dana 24. listopada 2012. godine donijelo je

ODLUKU

Prihvaća se Izvješće Povjerenstva za ocjenu i obranu doktorskog rada kojim se prihvaća doktorski rad Marijane Mijaković, prof., pod naslovom „Mikroheterogenost u vodenoj otopini etanola (Michroheterogeneity in the ethanol-wather mixture)“.

Dekan:



prof. dr. sc. Marko Rosić