

Oznaka poročila: ARRS-RPROJ-ZP-2016/1



ZAKLJUČNO POROČILO RAZISKOVALNEGA PROJEKTA

A. PODATKI O RAZISKOVALNEM PROJEKTU

1. Osnovni podatki o raziskovalnem projektu

Šifra projekta	Z2-5464
Naslov projekta	TiO ₂ nanocevke kot katalizator za odstranjevanje strupenih in biološko nerazgradljivih vodnih onesnažil s procesom mokre oksidacije
Vodja projekta	28564 Boštjan Erjavec
Tip projekta	Za Podoktorski projekt - aplikativni
Obseg raziskovalnih ur	2550
Cenovni razred	B
Trajanje projekta	08.2013 - 07.2015
Nosilna raziskovalna organizacija	104 Kemijski inštitut
Raziskovalne organizacije - soizvajalke	
Raziskovalno področje po šifrantu ARRS	2 TEHNIKA 2.02 Kemijsko inženirstvo 2.02.04 Kataliza in reakcijsko inženirstvo
Družbeno-ekonomski cilj	
Raziskovalno področje po šifrantu FOS	2 Tehniške in tehnološke vede 2.04 Kemijsko inženirstvo

B. REZULTATI IN DOSEŽKI RAZISKOVALNEGA PROJEKTA

2. Povzetek raziskovalnega projekta¹

SLO

Osnovni namen raziskovalno razvojnega projekta je bil razvoj novih, naprednih katalizatorjev za odstranjevanje, tj. popolno oksidativno destrukcijo oziroma mineralizacijo, modelnih estrogeno aktivnih substanc iz odpadnih vod s procesom katalitske mokre oksidacije

(CWAO), kot visoko učinkovitim predstavnikom naprednih čistilnih postopkov (AOPs). Katalizatorji, ki so bili v sklopu projekta razviti in nato uporabljeni v CWAO procesu, so ekološko in ekonomsko sprejemljivi, saj je bila njihova osnova TiO_2 in niso vsebovali žlahtnih kovin ali kovinskih oksidov Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn in Mo, ki se pogosto izlužujejo in tako vplivajo na kakovost čiščenja vod.

Učinkovitost odstranjevanja spojin iz modelnih vodnih raztopin onesnažil in realnih odpadnih vod (izcedne vode), kakor tudi kemijska obstojnost katalizatorjev v AOP procesu, je bila ovrednotena v pretočnem kapalnem reaktorju s strnjenim slojem katalizatorja (CWAO testi). Za primerjavo smo določili učinkovitost odstranjevanja vodnih onesnažil z novo pripravljenimi katalizatorji tudi v AOP procesu heterogene fotokatalitske oksidacije, ki je poteka ob prisotnosti UV oziroma vidne svetlobe.

Poglavitni cilji predloženega raziskovalno razvojnega so bili naslednji:

- a) sinteza novih, naprednih katalizatorjev z veliko specifično površino, ki temeljijo na TiO_2 (različne strukture, velikosti in oblike aktivnih delcev) in so namenjeni za katalitsko mokro oksidacijo estrogene aktivnih substanc.
- b) karakterizacija katalizatorjev pred in po uporabi v CWAO procesu, ki bo usmerjena na preučevanje teksturalnih, površinskih in strukturnih lastnosti materialov (HRTEM, SEM, UV-VIS-DR, XRD, BET, TPO, FTIR, itd.)
- c) analiza aktivnosti in določevanje kvantitativne strukturno-aktivnostne (QSAR) odvisnosti naprednih katalizatorjev v proučevanem procesu heterogene katalitske mokre oksidacije.
- d) oceniti učinkovitost preučevanega CWAO procesa z določevanjem konverzije onesnažil in koncentracije intermediatov, eventuelno nastalih med oksidativno destrukcijo (HPLC, TOC, IC, KPK, UV-VIS, ...), ter z določevanjem akutne toksičnosti in estrogenske aktivnosti pred in po obdelavi voda.
- e) primerjava učinkovitosti degradacije biološko nerazgradljivih spojin z naprednimi TiO_2 katalizatorji v procesu heterogene fotokatalitske oksidacije.

ANG

The project aimed to develop innovative heterogeneous catalysts for the removal (i.e. complete oxidative degradation or mineralisation) of emerging pollutants from model aqueous samples and real wastewaters by means of catalytic wet-air oxidation (CWAO) process, as an example of advanced oxidation processes (AOPs). The catalysts, which were developed and subsequently used in the CWAO process, were ecologically and economically acceptable, i.e. without the presence of noble metals or mixed metal oxides of Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn and Mo, which are often prone to leaching. Therefore, the composition of proposed catalysts was based only on innocuous and inexpensive TiO_2 .

A continuous-flow, three-phase trickle-bed reactor was applied for evaluation of catalyst activity and chemical stability during CWAO as well as determination of the removal efficiency of pollutants from model aqueous samples and real effluents (e.g. landfill leachates). For comparison, the removal efficiency of refractory water pollutants with newly prepared catalysts was determined by heterogeneous photocatalytic oxidation process as an important representative of AOPs, using different radiation sources (UV and visible light).

The main OBJECTIVES of proposed project were as follows:

- a) to synthesize novel and advanced high surface area catalysts based on TiO_2 (different structure, size and morphology of active particles) intended for CWAO and heterogeneous photocatalysis of various emerging pollutants;
- b) to characterize the catalysts before and after usage in CWAO, with emphasis on a detailed examination of textural, structural and surface chemical properties of developed materials by a variety of advanced techniques (HRTEM, SEM, UV-VIS-DR, XRD, BET, TPO, FTIR, etc.);
- c) activity tests and determination of quantitative structure-activity relationships (QSAR) of advanced catalysts in heterogeneous catalytic wet-air oxidation process;
- d) to evaluate the effectiveness of CWAO by determining conversions of model pollutants and concentrations of potential intermediates formed during the oxidative destruction (HPLC, TOC, IC, COD, UV-VIS, etc.) as well as acute toxicity and estrogenicity of feed and end-product solutions;
- e) to compare the removal efficiency of bio-nondegradable compounds with advanced TiO_2 catalysts using the process of heterogeneous photocatalytic oxidation.

3. Poročilo o realizaciji predloženega programa dela na raziskovalnem projektu²

Strupene in biološko nerazgradljive spojine, kot so npr. estrogeno aktivne substance, so prisotne v odpadnih vodah številnih industrijskih procesov, vodotokih in pitni vodi. Odstranjevanje prioritetnih onesnažil iz vod je pogosto zahtevno zaradi njihove obstojnosti in slabe topnosti v vodi, zaradi česar odstranjevanje z biološkimi postopki ni učinkovito. Edina prava možnost za odstranjevanje obstojnih onesnažil so napredni oksidacijski procesi (AOPs), ki temeljijo na kemijski oksidaciji. V pričujočem raziskovalnem projektu smo izbrano onesnažilo (bisfenol A) oksidativno odstranjevali iz vodnih vzorcev z dvema različnima naprednima oksidacijskima procesoma, in sicer s katalitsko mokro oksidacijo (CWAO) in heterogeno fotokatalitsko oksidacijo. Skupni imenovalac omenjenih procesov je oksidacija v vodi raztopljenega organskega onesnažila v prisotnosti trdnih katalizatorjev. Slednji omogočajo nastanek hidroksilnih radikalov, ki sodelujejo skupaj z dovedeno energijo (npr. toploto) v reakcijskih stopnjah, ki vodijo v razgradnjo onesnažil. Popolno mineralizacijo raztopljenih organskih onesnažil v vodnih vzorcih smo poskušali doseči z vodenjem CWAO procesa v katalitski koloni z mehurčki ali trifaznih kapalnih reaktorjih pri visokih tlakih in temperaturah, medtem je proces heterogene fotokatalitske oksidacije potekal pri ambientalnih pogojih. Pomenljiv poudarek je bil na razvoju novih ter bolj aktivnih katalizatorjev, ki bi omogočali večjo učinkovitost procesa ter hkrati znižajo obratovalne stroške. Večina katalizatorjev, ki se uporablja v CWAO procesu, je iz žlahtnih kovin ali mešanih kovinskih oksidov. Uporaba heterogenih katalizatorjev na osnovi plemenitih kovin močno zviša ceno CWAO procesa, medtem ko se kovinski oksidi pogosto izlužujejo. To sta ključna razloga, da smo vodili razvoj katalizatorjev za CWAO procese v smeri enostavnih, ekološko ter ekonomsko sprejemljivih katalizatorjev, torej brez nanešenih plemenitih kovin in kovinskih oksidov. Osnovni cilj sinteze novih katalizatorjev je bil v tem, da bi le-ti v AOP procesih

omogočili dolgotrajno in učinkovito odstranjevanje prioriternih onesnažil iz vodnih vzorcev in odpadnih vod. Namreč izkazalo se je, da v procesih obdelave in razgradnje kemikalij lahko nastajajo vmesni in končni produkti, ki kažejo enake ali celo večje biološke učinke na vodne organizme kot izhodna onesnažila. Zato smo striktno v obdelanih vzorcih preverjali ne le fizikalno-kemijske parametre, temveč tudi potencialne škodljive biološke učinke in potencialno biorazgradljivost. Torej, reprezentativno zajeti kapljevinski vzorci so bili analizirani tako s kemijskimi analiznimi metodami kot tudi z biološkimi testi, ki so pokazali uspešnost čiščenja modelnih in realnih vodnih vzorcev.

V prvi četrtini projekta je bilo raziskovalno delo usmerjeno v sintezo (hidrotermalno sintezo v alkalnem mediju) in karakterizacijo titanatnih nanocevk, ki so predstavljale izhodišče za pripravo učinkovitih katalizatorjev za katalitsko oksidacijo strupenih in biološko nerazgradljivih organskih onesnažil v vodnih vzorcih. Optimizirana je bila sinteza, katere rezultat so bile titanatne nanocevke z visoko specifično površino. Selekcioniran produkt (t.j., uniformne titanatne nanocevke) je bil toplotno obdelan pri različnih temperaturah, s čimer smo varirali fizikalno-kemijske lastnosti katalizatorjev. Ob koncu prve četrtine smo izbrali modelno onesnažilo in opravili vzorčenje realnih odpadnih vod. Druga četrtina projekta je bila podrejena izvajanju katalitske mokre oksidacije (CWAO) onesnaženih vod na osnovnih TiO_2 katalizatorjih. V tretji četrtini smo iste katalizatorje preučili še v procesu heterogene fotokatalitske oksidacije. Tekom celotne druge in tretje četrtine smo simultano izvajali kemijske analize onesnaženih vodnih vzorcev pred in po čiščenju z naprednima oksidacijskima procesoma. V drugi polovici druge četrtine in tretji četrtini smo med drugim sintetizirali in okarakterizirali modificirane TiO_2 katalizatorje, ki so bili testirani v CWAO procesu in heterogeni fotokatalizi. Četrta četrtina raziskovalnega projekta je bila v celoti posvečena izvajanju testov strupenosti in estrogenosti. Slednji so zajemali vhodne raztopine in čiščene bodisi v procesu heterogene katalitske mokre oksidacije (CWAO) bodisi v procesu heterogene fotokatalitske oksidacije.

Katalizatorji, ki so bili v osnovi naključno orientirane titanatne nanocevke s povprečnim premerom 15 nm in dolžino nekaj mikrometrov, so bili sintetizirani z alkalno hidrotermalno sintezo. Specifična površina tako pripravljenih (po hidrotermalni sintezi 24 h na $130\text{ }^\circ\text{C}$ z razmerjem reaktantov 2 g TiO_2 na 150 ml 10 M NaOH) titanatnih nanocevk je znašala približno $400\text{ m}^2/\text{g}$, kar je predstavljalo dobro izhodišče za pripravo katalizatorjev na osnovi TiO_2 .

V naslednjem koraku smo sintetizirane titanatne nanocevke termično obdelali pri temperaturah od 300 do $700\text{ }^\circ\text{C}$ z vmesnimi koraki po $100\text{ }^\circ\text{C}$. Znano je, da v temperaturnem območju od 400 do $500\text{ }^\circ\text{C}$ poteče strukturna transformacija titanatnih nanocevk v termodinamsko bolj stabilno obliko TiO_2 , t.j., anataz. Na ta način smo dobili množico katalizatorjev, ki so izkazovali različne fizikalno-kemijske lastnosti. Z naborom različnih karakterizacijskih tehnik (SEM, TEM, XRD, BET, UV-VIS-DR He-piknometrija, idr.) smo teksturalne in površinske lastnosti sintetiziranih TiO_2 vzorcev okarakterizirali. Ugotovili smo, da z višanjem temperature kalcinacije BET specifična površina sintetiziranih

titanatnih nanocevk strmo upada. Pri najvišji kalcinacijski temperaturi (700 °C) je BET specifična površina znašala le še 49 m²/g. Hkrati se je tudi struktura nanocevk temeljito spreminjala, saj se je pri 400 °C pojavila struktura anataza. Kristaliti slednjega so z višanjem temperature rastle, kar smo določili s pomočjo rentgenske praškovne difrakcije. Toplotna obdelava nanocevk je vplivala tudi na površinski karakter nanocevk, t.j. kislost površine, ki se je iz izhodiščnega kislega postopoma spremenil v bazičnega. Različne fizikalno-kemijske lastnosti pripravljenih nanodelcev so pomembno vplivale na katalitsko aktivnost materialov, kar smo potrdili v procesu katalitske mokre oksidacije v vodi raztopljenega onesnažila bisfenola A (BPA). Pokazali smo, da je mogoče z uporabo titanatnih nanocevk brez dodanih plemenitih kovin ali kovin prehoda doseči pretvorbo BPA v CO₂ in H₂O v času 15 s, kolikor je znašal zadrževalni čas onesnažila v sloju katalizatorja. Ugotovili smo, da poleg same specifične površine titanatnih nanocevk na hitrost reakcije oksidacije vpliva tudi kristalna struktura TiO₂. Izkazalo se, da delci katalizatorja po kalcinaciji na 600 °C izkazujejo skoraj 4 krat nižjo specifično površino v primerjavi z izhodiščnimi nanocevkami, vendar je njihova prevladujoča kristalna struktura anataz, zaradi česar je katalizator dosegel znatno višje konverzije BPA. Pokazali smo, da je to optimalna temperatura za pripravo katalizatorjev na osnovi titanatnih nanocevk, saj so bili rezultati odstranjevanja onesnažila s katalizatorjem pripravljenim pri višji oziroma nižji temperaturi slabši, kar je bila posledica manj uravnoveženih osnovnih delcev v smislu razmerja med specifično površino in strukturno sestavo.

Po izvedbi eksperimentov z enkratnim prehodom kapljevinske faze v trifaznem kapalnem reaktorju, smo stopnjo mineralizacije modelnega onesnažila BPA poskušali izboljšati z recikliranjem kapljevinske faze (5-kratni in 10-kratni recikel, $V(\text{BPA}_0) = 300 \text{ ml}$, $C_0 = 10 \text{ mg/l}$ pri $t = 0$). Na ta način smo povečali zadrževalni čas iz 14 s (enkratni prehod) na 70 (5-kratni prehod) oziroma 140 s (10-kratni prehod). Konverzija BPA se je povečevala s časom in je bila v obeh primerih (5 in 10-kratni recikel) popolna po 50 h. Kot pričakovano, se je TOC konverzija povečevala s številom reciklov. 73 % (5-kratni recikel) in 98 % (10-kratni recikel) začetnega organskega onesnaženja smo na koncu poskusa uspešno pretvorili do CO₂ in H₂O. Višjo stopnjo mineralizacije v primeru recikliranja kapljevinske faze pripisujemo oksidaciji nastalih vmesnih produktov, ki jih je zaradi njihove trdovratne narave potrebno izpostaviti daljšim zadrževalnim časom.

Deponijsko izcedno vodo (DIV) smo pridobili na centralnem odlagališču odpadkov Barje, Ljubljana, Slovenija. Filtrirano DIV smo nato okarakterizirali z uporabo naslednjih parametrov: pH, prevodnost, KPK, BPK₅, TOC, prisotni anioni in kationi. Katalitsko mokro oksidacijo smo izvedli v prisotnosti čistega TiO₂ in Ru/TiO₂, medtem ko smo reakcijo vodili pri 200 oziroma 230 °C. Pri dvigu temperature in uporabi čistega TiO₂ se KPK konverzija poviša iz 20,2 na 32,6 %; BPK₅ iz 45,0 na 54,0 % in TOC konverzija iz 24,1 na 43,8 %. S povečanjem mase čistega TiO₂ iz 0,3 na 0,5 g dosežemo nadaljnje izboljšanje omenjenih parametrov, vendar ima povečanje mase manjši vpliv kot dvig temperature. Opazno izboljšanje stopnje konverzije, ne glede na

opazovani parameter, smo opazili v primeru uporabe Ru/TiO₂. Ru/TiO₂_600 je bil izmed testiranih katalizatorjev najbolj aktiven, saj je omogočil 59,6 % KPK, 71 % BPK₅ in 75 % TOC konverzijo. Titanatne nanocevice (TNTs), ki so bile pripravljene z alkalno hidrotermalno sintezo in nato še kislinsko protonirane pri sobni temperaturi, so bile testirane tudi v procesu heterogene fotokatalitske oksidacije modelnega onesnažila BPA. Dobljene nanocevice z visoko specifično površino so bile modificirane na po dveh različnih postopkih: (i) s temperaturno obdelavo v temperaturnem območju od 300 do 700 °C in (ii) obdelavo z vodikovim peroksidom pri sobnih pogojih. Konverzije BPA in TOC so potrdile, da pri toplotno obdelanih vzorcih, BET specifična površina in kristaliničnost delcev narekujejo fotooksidacijsko moč reakcije. V primeru nanocev, obdelanih z vodikovim peroksidom, smo opazili skoraj trikratno povečanje odstranjevanja BPA v primerjavi z izhodiščnimi nanocevkami, kar pripisujemo površinski redoks reakciji titanovih(IV) perokso skupin. V primeru, da smo izpostavili delce anataza raztopini H₂O₂, smo opazili manjšo fotokatalitsko aktivnost kot posledica oksidiranih površinskih Ti³⁺ defektnih mest, in s tem hitreje e⁻-h⁺ rekombinacije in manjše adsorpcije kisika. Izmed testiranih fotokatalizatorjev smo najvišjo hitrost reakcije dosegli s katalizatorjem, ki je bil kalciniran pri 500 °C. Toksični potencial obdelanih vzorcev smo ugotavljali s testi strupenosti z organizmi različnih taksonomskih skupin, ker smo pričakovali, da bo občutljivost organizmov vrstno specifična. Strupenost čiščenih vzorcev v omenjenem procesu je znatno padla v toksikoloških testih z vodnimi bolhami in embriji rib zebrič. V nasprotju s tem so bili rezultati strupenosti z bakterijami in zelenimi algami. Elementna analiza z ICP-MS metodo recikliranih vzorcev je potrdila povišano vsebnost strupenih kovin kot so krom, nikelj, molibden, srebro, in cink. Prisotnosti slednjih v vzorcih fotokatalitske oksidacije (izvedeno v steklenem reaktorju pri sobni temperaturi in tlaku) nismo potrdili. Ti izsledki so jasno pokazali, da se pri izvajanju CWAO procesa (visoke temperature in tlaki) izlužujejo naštet kovine iz sten reaktorja in tako vplivajo na kakovost čiščene vode. Omenjeno slabost CWAO procesa je mogoče obiti z izbiro bolj korozijsko stabilnih konstrukcijskih materialov oziroma z uporabo naprednejših katalizatorjev, ki bi omogočili odstranjevanje organskih onesnažil pri bolj milih pogojih (nižje temperature in tlaki). V primeru fotokatalitskih testov so se čiščeni vzorci izkazali za nestrupene v primeru vseh štirih testov strupenosti. Prav tako so testi estrogenosti pokazali, da so čiščeni vzorci estrogeno neaktivni. Torej, napredna oksidacijska procesa (CWAO in fotokatalitska oksidacija) sta uspešno pretvorila estrogeno aktivne komponente (BPA in njegovi derivativi) v estrogeno neaktivne produkte (tj. CO₂, voda in alifatske kisline).

4. Ocena stopnje realizacije programa dela na raziskovalnem projektu in zastavljenih raziskovalnih ciljev³

Raziskovalna hipoteza v projektni nalogi je bila v celoti realizirana. Uspeli smo določiti sintezne pogoje, pri katerih smo sintetizirali titanatne nanocevice z visoko specifično površino (cca. 400 m²/g).

Izbrani produkt smo toplotno obdelati pri različnih kalcinacijskih temperaturah in dobljene vzorce (katalizatorje) temeljito preučili z različnimi karakterizacijskimi metodami (SEM, TEM, XRD, BET, UV-VIS-DR He-piknometrija, FTIR, idr.). Za modelno onesnažilo smo izbrali bisfenol A (BPA), ki je razširjena organska spojina, ki povzroča motnje v delovanju endokrinega sistema in posledično ovira razmnoževanje vodnih organizmov. Hkrati smo opravili tudi vzorčenje izcedne vode (realni vzorci) na treh mestih ljubljanske komunalne deponije Barje. Testiranje sintetiziranih katalizatorjev v procesu katalitske mokre oksidacije modelnega onesnažila BPA je bilo v celoti izvedeno, prav tako tudi kemijska analiza kapljevinaastih vzorcev na izstopu iz reaktorja z metodami UV-VIS, HPLC in TOC. Dodatno smo izvedli tudi teste katalitske mokre oksidacije v reaktorju z reciklom ter tako še znižali raven preostalega TOC v izpustu iz reaktorja. Vsi katalizatorji na osnovi TiO_2 so bili preučeni še v procesu heterogene fotokatalitske oksidacije vodnih raztopin BPA. V letu 2014 smo sintetizirali tudi modificirane katalizatorje, in sicer katalizatorje TiO_2 z dodanim rutenijem, ki o bili testirani v CWAO procesu za čiščenje izcedne deponijske vode, medtem ko so bili katalizatorji na osnovi TiO_2 , ki so bili modificirani z vodikovim peroksidom, testirani v procesu fotokatalitske oksidacije BPA. Izvedli smo teste strupenosti z izhodiščno modelno BPA raztopino in realno deponijsko izcedno vodo ter z vzorci po čiščenju v dveh različnih naprednih oksidacijskih procesih, tj., katalitski mokri oksidaciji in fotokatalitski oksidaciji. Testi strupenosti so bili izvedeni z vodnimi organizmi iz štirih taksonomskih skupin, kar je podalo širšo oceno strupenosti testiranih vzorcev. Testi estrogenosti so bili izvedeni z YES testom, s katerim smo potrdili, da čiščeni vzorci ne vsebujejo estrogensko aktivnih komponent in s tem tudi potrdili učinkovitost naprednih oksidacijskih procesov za čiščenje strupenih in estrogenu aktivnih vodnih onesnažil.

5. Utemeljitev morebitnih sprememb programa raziskovalnega projekta oziroma sprememb, povečanja ali zmanjšanja sestave projektne skupine⁴

Do sprememb raziskovalnega projekta NI prišlo.

6. Najpomembnejši znanstveni rezultati projektne skupine⁵

Znanstveni dosežek			
1.	COBISS ID	5149722	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Katalitska mokra oksidacija modelne raztopine bisfenola A v kapalnem reaktorju s strjenim slojem katalizatorja iz titanatnih nanocevk

	ANG	Catalytic wet air oxidation of bisphenol A model solution in a trickle-bed reactor over titanate nanotube-based catalysts
Opis	SLO	Katalizatorji na osnovi titanatnih nanocevk so bili pripravljene z alkalno hidrotermalno sintezo, kateri je sledila toplotna obdelava pri različnih temperaturah, in sicer v območju od 300 do 700 °C. Na opisani način pripravljene materiali (brez dodanih kovin) so bili uporabljeni kot katalizatorji v tri-faznem kapalnem reaktorju s strjenim slojem, kjer je potekala reakcija katalitske mokre oksidacije modelne raztopine bisfenola A (BPA). Pri danih eksperimentalnih pogojih smo opazili, da oksidacija BPA poteka tako po nekatalitski kot tudi po katalitski poti, ki je znatno bolj izrazita. Pri temperaturi 210 °C in masi katalizatorja 0,5 g, ki je bil predhodno kalciniran pri 600 °C, smo uspeli odstraniti ves BPA iz vodnega vzorca. Iz vidika odstranjevanja TOC smo uspeli doseči 70% konverzijo, kar kaže na to, da so v vzorcu ostali nezreagirani reakcijski intermedijati, ki so večinoma v obliki nižjih karboksilnih kislin.
	ANG	Titanate nanotube-based catalysts were prepared via alkaline hydrothermal synthesis route followed by heat-treatment at different temperatures, ranging from 300 to 700 °C. The resulting metal-free solids were then applied as a catalyst in a three-phase trickle-bed reactor, where catalytic wet air oxidation (CWAO) reactions of model aqueous Bisphenol A (BPA) solution were performed. It was observed in the given range of operating conditions that BPA undergoes both non-catalytic as well as catalytic oxidation routes, while the latter is far more pronounced. At 210 °C and in the presence of 0.5 g of titanate nanotube-based catalyst, which was annealed at 600 °C, a complete BPA removal was obtained. From TOC point of view, approximately 70% conversion was achieved indicating the persistence of refractory intermediates of lower carboxylic acids.
Objavljeno v		Elsevier; Applied catalysis. B, Environmental; 2013; Vol. 132/133; str. 342-352; Impact Factor: 6.007; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 1.798; A'': 1; A': 1; WoS: EI, IH, II; Avtorji / Authors: Erjavec Boštjan, Kaplan Renata, Djinović Petar, Pintar Albin
Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek
2.	COBISS ID	5312282
		Vir: COBISS.SI
Naslov	SLO	Titanatne nanocevkke kot nov katalizator za odstranjevanje strupenosti in estrogenosti bisfenola A v CWAO procesu
	ANG	Titanate nanotubes as a novel catalyst for removal of toxicity and estrogenicity of bisphenol A in the CWAO process
Opis	SLO	Katalitska mokra oksidacija (CWAO) vodne raztopine bisfenola A (BPA) je bila preučevana v pretočnem kapalnem reaktorju s strjenim slojem iz katalizatorja na osnovi titanatnih nanocevk. Katalizatorji na osnovi titanatnih nanocevk so bili pripravljene z alkalno hidrotermalno sintezo, kateri je sledila toplotna obdelava pri različnih temperaturah, in sicer v območju od 300 do 700 °C, s čimer smo variirali fizikalno-kemijske lastnosti. Cilj študije je bil preučiti učinkovitost odstranjevanja strupenosti in estrogenosti BPA v procesu CWAO in prisotnosti katalizatorjev na osnovi titanatnih nanocevk pri izjemno kratkem zadrževalnem času 0,6 min•gCAT•g ⁻¹ . Dodatno je bila izvedena nekatalitska destrukcija BPA v prisotnosti inertnih delcev SiC. Rezultat slednje reakcije so bili znatno višji učinki strupenosti in estrogenosti v primerjavi s katalitsko čiščenimi vodnimi vzorci. Pri temperaturi 210 °C in masi katalizatorja 0,5 g, ki je bil predhodno kalciniran pri 600 °C, smo dosegli 100% odstranitev estrogenosti in visoko redukcijo strupenosti v čiščenem vodnem vzorcu.
		Catalytic wet air oxidation (CWAO) of aqueous bisphenol A (BPA) solution was studied in a continuous-flow trickle-bed reactor in the presence of titanate nanotube-based catalysts. These active metal-free solids were

		ANG	prepared by alkaline hydrothermal synthesis followed by heat treatment at temperatures ranging from 300 to 700 °C, so that they would have varying physicochemical properties. The aim of the study was to investigate the removal efficiency of titanate nanotube-based catalysts used in the CWAO process to remove toxicity and estrogenicity of BPA at a very short space time of 0.6 min•gCAT•g ⁻¹ . In addition, noncatalytic BPA degradation in the presence of inert SiC particles was also performed. As a result, significantly higher estrogenicity and toxic effects of the liquid-phase sample compared to the catalytic oxidation experiments were observed. Complete removal of estrogenicity and high reduction of toxicity from aqueous solution were achieved at 210 °C over 0.5 g of catalyst that had been annealed at 600 °C.
	Objavljeno v		American Chemical Society; Industrial & engineering chemistry research; 2013; Vol. 52, iss. 35; str. 12559-12566; Impact Factor: 2.235;Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 1.798; WoS: II; Avtorji / Authors: Erjavec Boštjan, Tišler Tatjana, Kaplan Renata, Pintar Albin
	Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek
3.	COBISS ID	5262106	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Odstranjevanje bisfenola A in njegovih oksidacijskih produktov iz vodne raztopine z zaporedno katalitsko mokro oksidacijo in biološko razgradnjo
		ANG	Removal of bisphenol A and its oxidation products from aqueous solutions by sequential catalytic wet air oxidation and biodegradation
	Opis	SLO	Modelna vodna raztopina bisfenola A (BPA) s koncentracijo 10 mg L ⁻¹ je bila preučevana v pretočnem in zaporednem sistemu katalitske mokre oksidacije (CWAO)/aerobnega bioreaktorja. Mokra oksidacija s katalizatorjem na osnovi titanatnih nanocevk je dosegla skoraj kompletno odstranitev BPA (> 99%) pri izjemno kratkem zadrževalnem času 0,3 min•gCAT•g ⁻¹ . Prevladujoči produkti oksidacije v vodnem vzorcu po čiščenju v CWAO reaktorju so bili očetna in mravljinčna kislina ter p-hidroksiacetofenon (p-HAP). Vse našete spojine so bile nato učinkovito odstranjene v biološkem reaktorju z hidravličnim zadrževalnim časom 7,2 h. Čeprav je bila navidezna strupenost CWAO iztoka višja kot vhodna BPA raztopina, je bil CWAO iztok uspešno razstrupljen v procesu aerobne biološke razgradnje. Kombiniran sistem tako predstavlja potencialni čistilni proces za učinkovito odstranjevanje BPA in njegovi oksidacijskih derivatov iz odpadnih voda.
		ANG	Model aqueous solution of bisphenol A (BPA) of 10 mg L ⁻¹ was treated in a continuous and sequential catalytic wet air oxidation (CWAO)/aerobic bioreactor (BR) system. Wet oxidation with titanate nanotube-based catalyst resulted in nearly complete removal of BPA (> 99 %) at a very short space time of 0.3 min•gCAT•g ⁻¹ . The main identified oxidation products in the CWAO effluent were acetic acid, formic acid and p-hydroxyacetophenone (p-HAP). All of these compounds were consequently and efficiently removed in the BR system at a hydraulic residence time (HRT) of 7.2 h. Although apparent toxicity of the CWAO effluent was found higher than of the initial BPA solution, the former could be successfully detoxified through aerobic biodegradation. The combined system thus presents a potential treatment process for the efficient removal of BPA and its oxidative derivatives from wastewaters.
	Objavljeno v		American Chemical Society; Industrial & engineering chemistry research; 2013; Vol. 52, iss. 26; str. 9301-9307; Impact Factor: 2.235;Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 1.798; WoS: II; Avtorji / Authors: Mezohegyi Gergo, Erjavec Boštjan, Kaplan Renata, Pintar Albin
	Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek
4.	COBISS ID	5480986	Vir: COBISS.SI

	Naslov	SLO	Vpliv toplotne in peroksidne obdelave titanatnih nanocevk na njihovo fotokatalitsko aktivnost
		ANG	Effects of heat and peroxide treatment on photocatalytic activity of titanate nanotubes
	Opis	SLO	Titanatne nanocevkke (TNTs) so bile pripravljene z alkalno hidrotermalno sintezo, kateri je sledilo kislinsko protoniranje pri sobni temperaturi. Dobljene nanocevkke z visoko specifično površino so bile v nadaljevanju modificirane na po dveh različnih postopkih: (i) s temperaturno obdelavo v temperaturnem območju od 300 do 700 °C in (ii) obdelavo z vodikovim peroksidom pri sobnih pogojih. Bisfenol A, dobro znani hormonski motilec, je bil izbran kot testna kemikalija za določitev foto-oksidacijskega potenciala modificiranih titanatov. Konverzije BPA in TOC so potrdile, da pri toplotno obdelanih vzorcih, BET specifična površina in kristaliničnost delcev narekujejo foto-oksidacijsko moč reakcije. V primeru nanocevk, obdelanih z vodikovim peroksidom, smo opazili skoraj trikratno povečanje odstranjevanja BPA v primerjavi z izhodiščnimi nanocevkami, kar pripisujemo površinski redoks reakciji titanovih(IV) perokso skupin. V primeru, da smo izpostavili delce anataza raztopini H ₂ O ₂ , smo opazili manjšo fotokatalitsko aktivnost kot posledica oksidiranih površinskih Ti ³⁺ defektnih mest, in s tem hitrejše e ⁻ -h ⁺ rekombinacije in manjše adsorpcije kisika.
		ANG	Titanate nanotubes (TNTs) were prepared via alkaline hydrothermal synthesis route followed by acid washing at ambient conditions. The resulting high specific surface area nanotubular solids were further modified by two distinguished post-treatments: (i) heat-treatment in the temperature range from 300 to 700 °C, and (ii) peroxide-treatment at room temperature. Bisphenol A (BPA), a well-known endocrine disrupting compound (EDC), was selected as a testing molecule to evaluate the photodegradation potency of the modified TNTs. The resulting BPA and TOC removals confirmed that crystallinity and BET surface area of examined heat-treated solids play a crucial role in governing the photooxidation reaction. Regarding the peroxide-treated TNTs, a nearly three-fold improvement in BPA removal was attained in comparison to the pristine TNTs, which can be attributed to the redox reaction of surface titanium(IV) peroxo groups. However, the exposure of anatase-based samples to the H ₂ O ₂ medium resulted in deteriorated photocatalytic oxidation of the model compound, due to recovery of surface Ti ³⁺ defect sites, leading to increased e ⁻ -h ⁺ recombination and decreased oxygen adsorption.
	Objavljeno v		Elsevier; Symposium "Catalysis for pollution treatment" of the 11th edition of the Europacat Congress in Catalysis (EUROPACAT XI), Lyon, France, September 1-6, 2013; Catalysis today; 2015; Vol. 241, Pt. A; str. 15-24; Impact Factor: 3.893; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 1.668; A': 1; WoS: DW, EI, II; Avtorji / Authors: Erjavec Boštjan, Kaplan Renata, Pintar Albin
	Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek
5.	COBISS ID	5490202	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Katalitska mokra oksidacija raztopine bisfenola A v kapalnem reaktorju z reciklom in s strjenim slojem katalizatorja iz titanatnih nanocevk
		ANG	Catalytic wet air oxidation of bisphenol A solution in a batch-recycle trickle-bed reactor over titanate nanotube-based catalysts
			Katalitsko mokro oksidacijo (CWAO) uvrščamo med napredne oksidacijske procese, ki so dokazano učinkoviti pri odstranjevanju perečega onesnažila bisfenola A (BPA) iz voda. V študiji smo pokazali učinkovito odstranjevanje v vodi raztopljenega BPA v kapalnem reaktorju z reciklom in s strjenim slojem katalizatorja iz titanatnih nanocevk pri izjemno kratkem

Opis	SLO	zadrževalnem času 0,6 min•gCAT•g ⁻¹ . Najvišjo aktivnost pri oksidaciji raztopljenega BPA je izkazoval katalizator na osnovi titanatnih nanocevk, ki so bile toplotno obdelane pri 600 °C. Recikliranje kapljevinske faze (5 ali 10 kratno) je omogočilo 100 % konverzijo BPA že pri 200 °C in tudi visoko odstranitev celokupnega organskega ogljika (TOC), tj., 73 ali 98 %. Test stabilnosti je v času 189 h obratovanja potrdil stabilnost katalizatorja v danih reakcijskih pogojih.
	ANG	Catalytic wet air oxidation (CWAO) is classified as an advanced oxidation process, which proved to be highly efficient for the removal of emerging organic pollutant bisphenol A (BPA) from water. In this study, BPA was successfully removed in a batch-recycle trickle-bed reactor over bare titanate nanotube-based catalysts at very short space time of 0.6 min gCAT g ⁻¹ . The as-prepared titanate nanotubes, which underwent heat treatment at 600 °C, showed high activity for the removal of aqueous BPA. Liquid-phase recycling (5- or 10-fold recycle) enabled complete BPA conversion already at 200 °C, together with high conversion of total organic carbon (TOC), i.e., 73 and 98 %, respectively. The catalyst was chemically stable in the given range of operating conditions for 189 h on stream.
Objavljeno v	Springer; Environmental science and pollution research international; 2014; Vol. 21, iss. 19; str. 11313-11319; Impact Factor: 2.828; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.193; A': 1; WoS: JA; Avtorji / Authors: Kaplan Renata, Erjavec Boštjan, Senila Marin, Pintar Albin	
Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek	

7. Najpomembnejši družbeno-ekonomski rezultati projektne skupine⁶

Družbeno-ekonomski dosežek		
1.	COBISS ID	5177626 Vir: COBISS.SI
Naslov	SLO	Sodobni katalitski procesi na področju varstva okolja
	ANG	Modern catalytic processes in the field of environmental protection
Opis	SLO	Vabljen predavanje na delavnici "Primerljivost meritev na področju odpadnih voda", Kemijski inštitut, Ljubljana, 30.1.2013, Ljubljana. Predstavljen je bil postopek za pripravo katalizatorjev na osnovi titanatnih nanocev, karakterizacijske metode s katerimi smo preučili strukturne, morfološke in površinske lastnosti aktivnih delcev ter proces katalitske mokre oksidacije, s katerim smo v prisotnosti sintetiziranih katalizatorjev uspešno čistili vodne vzorce, onesnažene s hormonskim motilcem bisfenolom A.
	ANG	Invited lecture at the workshop "The comparability of measurement in the field of wastewaters", National Institute of Chemistry, Ljubljana, 01.30.2013, Ljubljana. The presentation comprehended a synthesis process for the preparation of catalysts based on titanate nanotubes, characterization methods for examination of structural, morphological and surface properties of the active particles and catalytic wet air oxidation process, which was applied to study the removal of endocrine disrupting chemical bisphenol A from contaminated water samples in the presence of synthesized catalysts.
Šifra	B.04 Vabljen predavanje	
Objavljeno v	Kemijski inštitut; 2013; Avtorji / Authors: Erjavec Boštjan, Osojnik Črnivec Ilja Gasan	
Tipologija	3.16 Vabljen predavanje na konferenci brez natisa	

2.	COBISS ID	5224986	Vir: COBISS.SI
	Naslov	<i>SLO</i> Heterogeno katalizirani procesi v okoljskih aplikacijah	
		<i>ANG</i> Environmental applications of heterogeneously catalyzed processes	
	Opis	<i>SLO</i> Vabljen predavanje na konferenci "Advanced Porous Materials Workshop 2013 (APMW-2013)". Predavanje je temeljilo okoljskih procesih, kot so npr. katalitska mokra oksidacija (CWAO), fotokatalitska oksidacija, itd., ki s pomočjo trdnega katalizatorja oksidirajo organska onesnažila do končnih produktov (CO ₂ in H ₂ O). Predstavljeni so bili novo razviti katalizatorji na osnovi titanatnih nanocevk, ki so se izkazali za izjemno učinkovite in okolju prijazne pri čiščenju vodnih vzorcev onesnaženih s hormonskim motilcem BPA v pretočnem kapalnem reaktorju s strjenim slojem.	
		<i>ANG</i> Invited lecture at the conference "Advanced Porous Materials Workshop 2013 (APMW-2013)". The lecture was based on environmental processes, such as catalytic wet air oxidation (CWAO), photocatalytic oxidation, etc. that rely on solid catalyst that oxidizes organic pollutants to final products (CO ₂ and H ₂ O). Furthermore, a newly developed catalysts based on titanate nanotubes, which have proven to be extremely efficient and environmentally friendly in cleaning water samples contaminated with endocrine disrupting chemical (BPA) in the continuous flow trickle-bed reactor.	
	Šifra	B.04 Vabljen predavanje	
	Objavljeno v	National Institute of Chemistry; Proceedings of the Advanced Porous Materials Workshop 2013 (APMW-2013), Ljubljana, Slovenia, 18-19 April, 2013; 2013; Str. 15-16; Avtorji / Authors: Erjavec Boštjan, Djinović Petar, Osojnik Črnivec Ilja Gasan, Pintar Albin	
	Tipologija	1.10 Objavljeni povzetek znanstvenega prispevka na konferenci (vabljen predavanje)	
3.	COBISS ID	5621274	Vir: COBISS.SI
	Naslov	<i>SLO</i> Heterogena fotokatalitska oksidacija in katalitska mokra oksidacija bisfenola A v prisotnosti čistih TiO ₂ polimorfov	
		<i>ANG</i> Heterogeneous photocatalytic oxidation and catalytic wet air oxidation of bisphenol A over bare TiO ₂ polymorphs	
	Opis	<i>SLO</i> Predavanje na konferenci "9th International symposium on CAtalysis in MULtiphase REactors, 8th International Symposium on Multifunctional Reactors", December 7-10, 2014, Lyon, France. Predstavljeno je bilo delo s področja priprave, karakterizacije in uporabe TiO ₂ katalizatorjev v procesih heterogene fotokatalitske oksidacije in katalitske mokre oksidacije.	
		<i>ANG</i> Lecture at the conference "9th International symposium on CAtalysis in MULtiphase REactors, 8th International Symposium on Multifunctional Reactors", December 7-10, 2014, Lyon, France. The presentation comprehended synthesis, characterization and testing of TiO ₂ -based catalysts in heterogeneous photocatalytic oxidation and catalytic wet air oxidation processes.	
	Šifra	F.02 Pridobitev novih znanstvenih spoznanj	
	Objavljeno v	[s. n.]; Book of abstracts; 2014; Str. 83-84; Avtorji / Authors: Kaplan Renata, Erjavec Boštjan, Pintar Albin	
	Tipologija	1.12 Objavljeni povzetek znanstvenega prispevka na konferenci	
4.	COBISS ID	3737713	Vir: COBISS.SI
	Naslov	<i>SLO</i> Fotokatalitska oksidacija bisfenola A in njegovih analogov z imobiliziranim TiO ₂	
		<i>ANG</i> Photocatalytic oxidation of bisphenol A and its analogs with immobilized	

		TiO ₂
Opis	SLO	So-mentor pri magistrskem delu (bolonjski študij), kjer smo razvili imobilizirane TiO ₂ fotokatalizatorje in jih testirali v procesu fotokatalitske oksidacije bisfenolov
	ANG	Co-Supervisor for Master's Theses (Bologna study programme), where we developed immobilized TiO ₂ photocatalysts and tested them in a photocatalytic oxidation process of bisphenols
Šifra	D.11 Drugo	
Objavljeno v	[P. Hudoklin]; 2014; XII, 57 f.; Avtorji / Authors: Hudoklin Petra	
Tipologija	2.09 Magistrsko delo	
5.	COBISS ID	5530138 Vir: COBISS.SI
Naslov	SLO	Hidrotermalna sinteza in strukturna karakterizacija svežih ter toplotno obdelanih titanatnih nanocevk
	ANG	Hydrothermal synthesis and structure characterization of fresh and heat-treated titanate nanotubes
Opis	SLO	Mentor pri diplomskem delu (bolonjski študij 1. stopnje), kjer smo natančno preučili vpliv parametrov hidrotermalne sinteze na strukturo titanatnih nanocevk.
	ANG	Supervisor for undergraduate thesis (1st cycle Bologna study programme), where a thorough titanate nanotube structure analysis was performed as a response on variation of synthesis parameters.
Šifra	D.11 Drugo	
Objavljeno v	[V. Rihar]; 2014; IX, 44 str.; Avtorji / Authors: Rihar Veronika	
Tipologija	2.11 Diplomsko delo	

8. Drugi pomembni rezultati projektne skupine^Z

--

9. Pomen raziskovalnih rezultatov projektne skupine⁸

9.1. Pomen za razvoj znanosti²

SLO

Rezultati, ki smo jih pridobili tekom izvajanja razvojnega projekta, so predstavljeni kot znanstvene objave v vodilni mednarodni periodiki, namenjeni okolju in okoljskim tehnologijam, ter kot predstavitve na domačih in mednarodnih znanstvenih srečanjih in tudi kot zapisi v mednarodnih bazah podatkov. Na podlagi projekta smo predvsem obogatili znanje na področju sinteze, karakterizacije in uporabe naprednih nanostrukturiranih katalizatorjev in, kar je še pomembnejše, na področju odstranjevanja v vodi prisotnih motilcev hormonskih sistemov in s tem povezane strupenosti in estrogenosti. Cilj projekta je bil uporaba novih katalizatorjev na osnovi TiO₂ in tako znižati ceno CWAO procesa ter zagotoviti temeljito odstranjevanje nevarnih, biološko nerazgradljivih vodnih onesnažil, brez dodatnega obremenjevanja okolja. Pridobili smo pomembna podatke, znanja in izkušnje o vplivu fizikalno-kemijskih lastnosti katalizatorjev na učinkovitost odstranjevanja prioriteten organskih onesnažil, kar bo pomembno pripomoglo k izboljšanju učinkovitosti ne le CWAO procesa, ampak tudi ostalih naprednih oksidacijskih procesov, ki temeljijo na katalitski oksidaciji organskih onesnažil.

ANG

The results that we have obtained during the implementation of research project, are presented as scientific publications in leading refereed journals devoted to the environment and environmental technologies, as well as presentations at national and international scientific meetings, as well as records in international databases. On the basis of the project we have

certainly enriched the knowledge on synthesis, characterization and application of advanced nanostructured catalysts and, more importantly, in the field of treatment of endocrine-disrupting compounds found in wastewaters and related toxicity and estrogenicity. The aim of the project was to use newly developed catalysts based on TiO₂ and thus reduce the price CWAO process and ensure thorough removal of hazardous, non-biodegradable water pollutants, without burdening the environment. We have obtained important data, knowledge and experiences on the influence of the catalyst physico-chemical properties on the removal efficiency of organic priority pollutants. This will significantly contribute to improving the efficiency of not only CWAO process, but also of other advanced oxidation processes based on catalytic oxidation of organic pollutants.

9.2. Pomen za razvoj Slovenije¹⁰

SLO

Projekt temelji na razvoju in uporabi inovativnih katalizatorjev v naprednih oksidacijskih procesih za učinkovito odstranjevanje motilcev endokrinega sistema iz vodnih vzorcev. Sklepamo, da so rezultati in izsledki projekta pomembni in uporabni za gospodarske družbe, saj je odstranjevanje teh komponent iz vod na mestu nastanka onesnaženja pomemben in akuten okoljski problem. Ukrepanje z inovativnim pristopom bo po našem prepričanju pomembno vplivalo na ohranitev naravne dediščine in biotske raznolikosti. Razvoj naprednih in učinkovitih procesov čiščenja voda je izredno pomemben tudi za trajnostni razvoj Slovenije, kot tudi za zagotavljanje zdravja ter visoke kvalitete bivanja.

ANG

The project is based on the development and application of innovative catalysts for efficient removal of EDCs from aqueous samples by means of advanced oxidation processes. We estimate that the results and findings of the project are important and relevant for companies which are dealing with these pollutants on a regular basis. Namely, pollution control and remediation is considered as crucial and acute environmental problem. In our opinion, action through innovative approaches will have a significant impact on the conservation of natural heritage and biodiversity. Development of advanced and efficient processes for water purification is also extremely important for sustainable development of Slovenia, as well as to ensure the health and high quality of life.

10. Samo za aplikativne projekte in podoktorske projekte iz gospodarstva!

Označite, katerega od navedenih ciljev ste si zastavili pri projektu, katere konkretne rezultate ste dosegli in v kakšni meri so doseženi rezultati uporabljeni

Cilj		
F.01	Pridobitev novih praktičnih znanj, informacij in veščin	
	Zastavljen cilj	<input checked="" type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text" value="Dosežen"/> ▼
	Uporaba rezultatov	<input type="text" value="Delno"/> ▼
F.02	Pridobitev novih znanstvenih spoznanj	
	Zastavljen cilj	<input checked="" type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text" value="Dosežen"/> ▼
	Uporaba rezultatov	<input type="text" value="Delno"/> ▼
F.03	Večja usposobljenost raziskovalno-razvojnega osebja	
	Zastavljen cilj	<input checked="" type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text" value="Dosežen"/> ▼
	Uporaba rezultatov	<input type="text" value="Delno"/> ▼
F.04	Dvig tehnološke ravni	
	Zastavljen cilj	<input checked="" type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE

	Rezultat	Dosežen
	Uporaba rezultatov	Delno
F.05	Sposobnost za začetek novega tehnološkega razvoja	
	Zastavljen cilj	<input checked="" type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	Dosežen
	Uporaba rezultatov	Delno
F.06	Razvoj novega izdelka	
	Zastavljen cilj	<input checked="" type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	Dosežen
	Uporaba rezultatov	V celoti
F.07	Izboljšanje obstoječega izdelka	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input checked="" type="radio"/> NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.08	Razvoj in izdelava prototipa	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input checked="" type="radio"/> NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.09	Razvoj novega tehnološkega procesa oz. tehnologije	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input checked="" type="radio"/> NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.10	Izboljšanje obstoječega tehnološkega procesa oz. tehnologije	
	Zastavljen cilj	<input checked="" type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	Dosežen
	Uporaba rezultatov	V celoti
F.11	Razvoj nove storitve	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input checked="" type="radio"/> NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.12	Izboljšanje obstoječe storitve	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input checked="" type="radio"/> NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.13	Razvoj novih proizvodnih metod in instrumentov oz. proizvodnih procesov	
	Zastavljen cilj	<input checked="" type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	Dosežen

	Uporaba rezultatov	Delno
F.14	Izboljšanje obstoječih proizvodnih metod in instrumentov oz. proizvodnih procesov	
	Zastavljen cilj	<input checked="" type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	Dosežen
	Uporaba rezultatov	Delno
F.15	Razvoj novega informacijskega sistema/podatkovnih baz	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input checked="" type="radio"/> NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.16	Izboljšanje obstoječega informacijskega sistema/podatkovnih baz	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input checked="" type="radio"/> NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.17	Prenos obstoječih tehnologij, znanj, metod in postopkov v prakso	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input checked="" type="radio"/> NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.18	Posredovanje novih znanj neposrednim uporabnikom (seminarji, forumi, konference)	
	Zastavljen cilj	<input checked="" type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	Dosežen
	Uporaba rezultatov	V celoti
F.19	Znanje, ki vodi k ustanovitvi novega podjetja ("spin off")	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input checked="" type="radio"/> NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.20	Ustanovitev novega podjetja ("spin off")	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input checked="" type="radio"/> NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.21	Razvoj novih zdravstvenih/diagnostičnih metod/postopkov	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input checked="" type="radio"/> NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.22	Izboljšanje obstoječih zdravstvenih/diagnostičnih metod/postopkov	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input checked="" type="radio"/> NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	

F.23	Razvoj novih sistemskih, normativnih, programskih in metodoloških rešitev	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input checked="" type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.24	Izboljšanje obstoječih sistemskih, normativnih, programskih in metodoloških rešitev	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input checked="" type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.25	Razvoj novih organizacijskih in upravljavskih rešitev	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input checked="" type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.26	Izboljšanje obstoječih organizacijskih in upravljavskih rešitev	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input checked="" type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.27	Prispevek k ohranjanju/varovanje naravne in kulturne dediščine	
	Zastavljen cilj	<input checked="" type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	Dosežen <input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	Ni uporabljen <input type="text"/>
F.28	Priprava/organizacija razstave	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input checked="" type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.29	Prispevek k razvoju nacionalne kulturne identitete	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input checked="" type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.30	Strokovna ocena stanja	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input checked="" type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.31	Razvoj standardov	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input checked="" type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.32	Mednarodni patent	

	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input checked="" type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.33	Patent v Sloveniji	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input checked="" type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.34	Svetovalna dejavnost	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input checked="" type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.35	Drugo	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input checked="" type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>

Komentar

--

11.Samo za aplikativne projekte in podoktorske projekte iz gospodarstva!

Označite potencialne vplive oziroma učinke vaših rezultatov na navedena področja

	Vpliv	Ni vpliva	Majhen vpliv	Srednji vpliv	Velik vpliv	
G.01	Razvoj visokošolskega izobraževanja					
G.01.01.	Razvoj dodiplomskega izobraževanja	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	
G.01.02.	Razvoj podiplomskega izobraževanja	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	
G.01.03.	Drugo:	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02	Gospodarski razvoj					
G.02.01	Razširitev ponudbe novih izdelkov/storitev na trgu	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	
G.02.02.	Širitev obstoječih trgov	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.03.	Znižanje stroškov proizvodnje	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	
G.02.04.	Zmanjšanje porabe materialov in energije	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	
G.02.05.	Razširitev področja dejavnosti	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.06.	Večja konkurenčna sposobnost	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.07.	Večji delež izvoza	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.08.	Povečanje dobička	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.09.	Nova delovna mesta	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.10.	Dvig izobrazbene strukture zaposlenih	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.11.	Nov investicijski zagon	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>	

G.02.12.	Drugo:		<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.03	Tehnološki razvoj						
G.03.01.	Tehnološka razširitev/posodobitev dejavnosti		<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	
G.03.02.	Tehnološko prestrukturiranje dejavnosti		<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.03.03.	Uvajanje novih tehnologij		<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	
G.03.04.	Drugo:		<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.04	Družbeni razvoj						
G.04.01	Dvig kvalitete življenja		<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	
G.04.02.	Izboljšanje vodenja in upravljanja		<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.04.03.	Izboljšanje delovanja administracije in javne uprave		<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.04.04.	Razvoj socialnih dejavnosti		<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.04.05.	Razvoj civilne družbe		<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.04.06.	Drugo:		<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.05.	Ohranjanje in razvoj nacionalne naravne in kulturne dediščine in identitete		<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	
G.06.	Varovanje okolja in trajnostni razvoj		<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	
G.07	Razvoj družbene infrastrukture						
G.07.01.	Informacijsko-komunikacijska infrastruktura		<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.07.02.	Prometna infrastruktura		<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.07.03.	Energetska infrastruktura		<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.07.04.	Drugo:		<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.08.	Varovanje zdravja in razvoj zdravstvenega varstva		<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	
G.09.	Drugo:		<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	

Komentar

--

12.Pomen raziskovanja za sofinancerje¹¹

	Sofinancer		
1.	Naziv	HTZ Velenje, I.P., d.o.o.	
	Naslov	Partizanska cesta 78, 3320 Velenje	
	Vrednost sofinanciranja za celotno obdobje trajanja projekta je znašala:	26.563	EUR
	Odstotek od utemeljenih stroškov projekta:	25	%
	Najpomembnejši rezultati raziskovanja za sofinancerja	Šifra	
	1.	Izvirni znanstveni članek Objava znanstvenih dognanj v vodilni reviji (Applied Catalysis B: Environmental, Impact	A.01

		Factor: 5.825) s področja okoljske katalize.	
	2.	Vabljeni predavanja na konferenci "Advanced Porous Materials Workshop 2013 (APMW2013).	B.04
	3.	Vabljeni predavanja na delavnici "Primerljivost meritev na področju odpadnih voda", Kemijski inštitut, Ljubljana, 30.1.2013, Ljubljana.	B.04
	4.	Znanstveno odkritje (titanatne nanocevice kot katalizator za oksidacijo organskih onesnažil v procesu katalitske mokre oksidacije)	A.04
	5.	Izvirni znanstveni članek v reviji Industrial & engineering chemistry research	A.01
	Komentar		
	Ocena	Vzajemno sodelovanje se ocenjuje kot zelo uspešno, saj je razvoj, karakterizacija in testiranje katalizatorjev v procesu katalitske mokre oksidacije bisfenola A pripeljal do pomembnih znanstveno-raziskovalnih spoznanj in socio-ekonomskih rezultatov. Razviti katalizatorji izkazujejo visoko aktivnost in omogočajo učinkovito degradacijo strupenih in biološko nerazgradljivih organskih kemikalij iz vodnih vzorcev ter tako izkazujejo visoko uporabno vrednost.	

13. Izjemni dosežek v letu 2015¹²

13.1. Izjemni znanstveni dosežek

13.2. Izjemni družbeno-ekonomski dosežek

C. IZJAVE

Podpisani izjavljam/o, da:

- so vsi podatki, ki jih navajamo v poročilu, resnični in točni
- se strinjamo z obdelavo podatkov v skladu z zakonodajo o varstvu osebnih podatkov za potrebe ocenjevanja ter obdelavo teh podatkov za evidence ARRS
- so vsi podatki v obrazcu v elektronski obliki identični podatkom v obrazcu v pisni obliki
- so z vsebino zaključnega poročila seznanjeni in se strinjajo vsi soizvajalci projekta

Podpisi:

*zastopnik oz. pooblaščen oseba
raziskovalne organizacije:*

in

vodja raziskovalnega projekta:

Kemijski inštitut

Boštjan Erjavec

ŽIG

Datum:

7.3.2016

Oznaka poročila: ARRS-RPROJ-ZP-2016/1

-
- ¹ Napišite povzetek raziskovalnega projekta (največ 3.000 znakov v slovenskem in angleškem jeziku) [Nazaj](#)
- ² Napišite kratko vsebinsko poročilo, kjer boste predstavili raziskovalno hipotezo in opis raziskovanja. Navedite ključne ugotovitve, znanstvena spoznanja, rezultate in učinke raziskovalnega projekta in njihovo uporabo ter sodelovanje s tujimi partnerji. Največ 12.000 znakov vključno s presledki (približno dve strani, velikost pisave 11). [Nazaj](#)
- ³ Realizacija raziskovalne hipoteze. Največ 3.000 znakov vključno s presledki (približno pol strani, velikost pisave 11) [Nazaj](#)
- ⁴ V primeru bistvenih odstopanj in sprememb od predvidenega programa raziskovalnega projekta, kot je bil zapisan v predlogu raziskovalnega projekta oziroma v primeru sprememb, povečanja ali zmanjšanja sestave projektne skupine v zadnjem letu izvajanja projekta, napišite obrazložitev. V primeru, da sprememb ni bilo, to navedite. Največ 6.000 znakov vključno s presledki (približno ena stran, velikost pisave 11). [Nazaj](#)
- ⁵ Navedite znanstvene dosežke, ki so nastali v okviru tega projekta. Raziskovalni dosežek iz obdobja izvajanja projekta (do oddaje zaključnega poročila) vpišete tako, da izpolnite COBISS kodo dosežka – sistem nato sam izpolni naslov objave, naziv, IF in srednjo vrednost revije, naziv FOS področja ter podatek, ali je dosežek uvrščen v A'' ali A'. [Nazaj](#)
- ⁶ Navedite družbeno-ekonomske dosežke, ki so nastali v okviru tega projekta. Družbeno-ekonomski rezultat iz obdobja izvajanja projekta (do oddaje zaključnega poročila) vpišete tako, da izpolnite COBISS kodo dosežka – sistem nato sam izpolni naslov objave, naziv, IF in srednjo vrednost revije, naziv FOS področja ter podatek, ali je dosežek uvrščen v A'' ali A'.
- Družbeno-ekonomski dosežek je po svoji strukturi drugačen kot znanstveni dosežek. Povzetek znanstvenega dosežka je praviloma povzetek bibliografske enote (članka, knjige), v kateri je dosežek objavljen.
- Povzetek družbeno-ekonomskega dosežka praviloma ni povzetek bibliografske enote, ki ta dosežek dokumentira, ker je dosežek sklop več rezultatov raziskovanja, ki je lahko dokumentiran v različnih bibliografskih enotah. COBISS ID zato ni enoznačen, izjemoma pa ga lahko tudi ni (npr. prehod mlajših sodelavcev v gospodarstvo na pomembnih raziskovalnih nalogah, ali ustanovitev podjetja kot rezultat projekta ... - v obeh primerih ni COBISS ID). [Nazaj](#)
- ⁷ Navedite rezultate raziskovalnega projekta iz obdobja izvajanja projekta (do oddaje zaključnega poročila) v primeru, da katerega od rezultatov ni mogoče navesti v točkah 6 in 7 (npr. ni voden v sistemu COBISS). Največ 2.000 znakov, vključno s presledki. [Nazaj](#)
- ⁸ Pomen raziskovalnih rezultatov za razvoj znanosti in za razvoj Slovenije bo objavljen na spletni strani: <http://sicris.izum.si/> za posamezen projekt, ki je predmet poročanja [Nazaj](#)
- ⁹ Največ 4.000 znakov, vključno s presledki [Nazaj](#)
- ¹⁰ Največ 4.000 znakov, vključno s presledki [Nazaj](#)
- ¹¹ Rubrike izpolnite / prepisite skladno z obrazcem "izjava sofinancerja" <http://www.arrs.gov.si/sl/progproj/rproj/gradivo/>, ki ga mora izpolniti sofinancer. Podpisan obrazec "Izjava sofinancerja" pridobi in hrani nosilna raziskovalna organizacija – izvajalka projekta. [Nazaj](#)
- ¹² Navedite en izjemni znanstveni dosežek in/ali en izjemni družbeno-ekonomski dosežek raziskovalnega projekta v letu 2015 (največ 1000 znakov, vključno s presledki). Za dosežek pripravite diapozitiv, ki vsebuje sliko ali drugo slikovno gradivo v zvezi z izjemnim dosežkom (velikost pisave najmanj 16, približno pol strani) in opis izjemnega dosežka (velikost pisave 12, približno pol strani). Diapozitiv/-a priložite kot priponko/-i k temu poročilu. Vzorec diapozitiva je objavljen na spletni strani ARRS <http://www.arrs.gov.si/sl/gradivo/>, predstavitev dosežkov za pretekla leta pa so objavljena na spletni strani <http://www.arrs.gov.si/sl/analize/dosez/>. [Nazaj](#)

Obrazec: ARRS-RPROJ-ZP/2016 v1.00
F9-4A-94-25-37-1C-67-EC-6B-79-2A-A3-51-24-33-36-24-56-91-46