

Oznaka poročila: ARRS_ZV_RPROG_ZP_2008/931

ZAKLJUČNO POROČILO O REZULTATIH RAZISKOVALNEGA PROGRAMA V OBDOBJU 2004-2008

A. PODATKI O RAZISKOVALNEM PROGRAMU

1. Osnovni podatki o raziskovalnem programu

Šifra programa	P1-0021
Naslov programa	Nanoporozni materiali
Vodja programa	3373 Venčeslav Kaučič
Obseg raziskovalnih ur	38.250
Cenovni razred	D
Trajanje programa	01.2004 - 12.2008
Izvajalke programa (raziskovalne organizacije in/ali koncesionarji)	104 Kemijski inštitut 1013 IRMA, inštitut za raziskavo materialov in aplikacije, d.o.o.

B. REZULTATI IN DOSEŽKI RAZISKOVALNEGA PROGRAMA

2. Poročilo o realizaciji programa raziskovalnega programa¹

Namen programa **Nanoporozni materiali** je bil razvoj novih okolju prijaznih katalizatorjev na nanoporoznih nosilcih. Novi materiali naj bi bili sorodni mikroporoznim zeolitnim materialom, ki jih že nekaj časa uporabljamo kot okolju prijazne heterogene katalizatorje pri reakcijah oksidacij. Odlične katalitske lastnosti teh materialov so posledica vgradnje prehodnih kovin v silikatno ogrodje, kar vodi do stabilnih izoliranih aktivnih centrov. Uporaba mikroporoznih zeolitnih materialov, katerih premeri por segajo od 0.5 do 2 nm, pa je omejena, ko v katalitskih reakcijah sodelujejo molekule večjih kinetičnih premerov. Za takšne reakcije bi bili bolj primerni mezoporozni materiali s premeri por večjimi od 2 nm. Prav takim materialom smo se v okviru programa najbolj posvetili. Delo je potekalo zelo dobro, tako da so bili vsi predhodno zastavljeni cilji v celoti realizirani.

V okviru programa smo najprej pripravili več z manganom in titanom modificiranih mikroporoznih in mezoporoznih silikatnih materialov, npr. mikroporozna zeolita Silikalit-1 in Beta ter mezoporozna silikata MCM-41 in MCM-48. Mikroporozne in mezoporozne strukture smo raziskali z uklonom rentgenskih žarkov in s transmisijemskim mikroskopom z visoko ločljivostjo. Lokalno okolico mangana in titana smo določili z rentgensko absorpcijsko spektroskopijo (EXAFS, XANES) ter z jedrsko magnetno in elektronsko paramagnetno resonanco. Rezultati strukturne karakterizacije so pokazali, da so bili pripravljene mikroporozni in mezoporozni materiali termično stabilni in da so bila v njih prisotna katalitska mesta zaradi vgrajenega mangana in titana. Mezoporozna materiala MCM-41 in MCM-48 imata dovolj velike pore, da bi jih lahko uporabljali v katalitskih reakcijah, v katerih sodelujejo tudi večje molekule. Vendar pa pogosto ne dosežeta katalitske učinkovitosti mikroporoznih silikatov in tudi njuna hidrotermalna stabilnost je manjša. To so potrdili tudi katalitski testi opravljeni na z manganom modificiranih materialih MnS-1, MnMCM-41 in MnMCM-48. Ti testi so pokazali, da je pri reakcijah z majhnimi molekulami daleč najučinkovitejši katalizator mikroporozni MnS-1, medtem ko se pri reakcijah z večjimi molekulami bolje obnese mezoporozna MnMCM-41 in MnMCM-48, čeprav je njuna učinkovitost razmeroma nizka. Pogost problem modificiranih mezoporoznih materialov je tudi uhajanje prehodne kovine iz ogrodja, kar onemogoča

recikliranje in večkratno uporabo materiala v reakcijah.

Zaradi naštetih pomanjkljivosti mezoporoznih materialov smo poskusili najti postopek priprave novih mikroporoznih/mezoporoznih kompozitnih materialov, ki bi združevali dobre katalitske lastnosti in hidrotermalno stabilnost mikroporoznih materialov ter dobro dostopnost katalitskih centrov mezoporoznih materialov. Tako smo najprej razvili sintezni postopek za vgradnjo izoliranih kovinskih kationov (Ti, V, Mn, Fe) v zeolitne delce nanometrskih razsežnosti (100 nm), nato pa smo mikroporozne zeolitne nanodelce organizirali v mezoporozne matrice in na ta način res dobili mikro/mezoporozne kompozitne materiale, npr. TiBeta/MCM-41 in TiBeta/MCM-48. Ti kompozitni materiali omogočajo hitrejšo difuzijo molekul skozi mezopore in omogočajo večjo dostopnost do katalitskih centrov kot mikroporozni silikati. Katalitsko niso bili bistveno boljši od čistih mezoporoznih materialov, saj so testi pokazali, da sta mezoporozni TiMCM-41 in kompozitni TiBeta/MCM-41 približno enako katalitsko aktivna. Je pa kompozit hidrotermalno stabilnejši kot čisti mezoporozni materiali in tudi kovine ne uhajajo iz njegovega ogrodja. To pomeni, da je tak kompozit po katalitski reakciji moč reciklirati in ga ponovno uporabiti.

Premeri por v mezoporoznih materialih tipa MCM so reda velikosti 2 nm, silikatne stene, ki ločujejo pore, pa so tanke. Precej drugačen je mezoporozni silikatni material SBA-15, s katerim smo se začeli ukvarjati v zadnjem času. Tako premeri por kot debeline sten so v SBA-15 precej večji, zaradi česar smo na tem materialu lahko preskusili nov, inovativen način priprave kompozita. Namesto da bi mikroporozne zeolitne nanodelce poskusili vgraditi v stene mezoporoznega materiala, smo to pot poskusili drobna zeolitna zrna preprosto odložiti v mezopore oziroma na stene vnaprej pripravljenega SBA-15. Tak mikroporozni/mezoporozni zeolit bi imel več prednosti: (i) njegova priprava bi bila razmeroma enostavna, (ii) modificirani mikroporozni nanodelci v mezoporah bi bili dobro dostopni, (iii) bi se pa difuzija molekul, ki bi sodelovale v katalitski reakciji, ob katalitsko aktivnem zeolitnem zrnu nekoliko upočasnila, kar bi lahko povečalo učinkovitost katalize. Eno od ključnih vprašanj pri pripravi kompozita je bilo, kako pripraviti ustrezno majhne zeolitne nanodelce. Sintezo zeolita je bilo namreč treba ustaviti takoj, ko so delci začeli kazati zametke mikroporozne kristalne strukture in ko so bili še primerno majhni. Da bi dobili odgovore na to vprašanje, smo temeljito študirali nastajanje zeolitov ZSM-5 in TiBeta z jedrsko magnetno resonanco, infrardečo spektroskopijo, elektronsko mikroskopijo in z uklonom rentgenskih žarkov. Odgovori, ki smo jih dobili, so nam omogočili pripravo kompozitov ZSM-5/SBA-15 in TiBeta/SBA-15.

V okviru programa Nanoporozni materiali smo se poleg s silikatnimi ukvarjali tudi z aluminofosfatnimi materiali. Pripravili smo več z manganom in železom modificiranih stabilnih mikroporoznih in mezoporoznih materialov, npr. FeVPI-5, FeAlPO₄-34, FeHMA in MnHMA. Kratica HMA pri slednjih dveh materialih označuje heksagonalni mezoporozni aluminofosfat, kar pomeni, da imamo tu opravka z materialom, ki ima pore razporejene v heksagonalni sklad. Take pore so med sabo vzporedne, in ker vse potekajo v isti smeri, je v praksi notranjost delcev slabo dostopna molekulam. Velik korak k boljši dostopnosti katalitskih mest smo zato storili, ko smo uspeli pripraviti dva kubična aluminofosfatna mezoporozna materiala, v katerih pore potekajo vzdolž treh pravokotnih si smeri. Zaradi take razporeditve por in zaradi njihovih okrog 10 nanometrskih premerov, sta materiala zelo obetavna. Še več, pripravili smo ju tako v obliki prahu kot v obliki tankih filmov s tipično debelino okrog 500 nm, s čimer smo odprli dodatne zanimive možnosti uporabe. Prahova in filma smo temeljito okarakterizirali z uklonskimi tehnikami, tudi sinhrotronskimi za snemanje uklonov pri majhnih kotih, z visokoločljivo elektronsko mikroskopijo in z infrardečo spektroskopijo. Kondenzacijo aluminofosfatnega ogrodja v filmu in prahu smo zasledovali ex-situ z jedrsko magnetno resonanco.

Nekoliko drugačna skupina materialov, ki smo jo v manjši meri še študirali v okviru programa, so hibridni materiali s kovinsko-organskim poroznim ogrodjem. Ti materiali so zgrajeni iz togih podolgovatih organskih gradnikov, ki so z močnimi kovalentnimi vezmi vezani na anorganska stičišča. Materiali imajo zelo velike notranje površine, zato so zanimivi za katalizo in adsorpcijo, še bolj pa za shranjevanje vodika. V okviru programa smo sintetizirali več hibridnih materialov z različnimi organskimi in kovinskimi gradniki. Ugotovili smo, da je pri izbiri gradnika zelo pomembno, da je le ta res tog. Tako so na primer tri-dimenzionalne strukture nastale z oksalatnimi in tereftalatnimi ioni, ne pa tudi z malonatnimi ioni, v katerih pride do proste rotacije okoli dveh vezi C-C.

Karakterizacija strukturnih značilnosti (porazdelitev velikosti por in njihova urejenost) ter katalitskih lastnosti (mesto vgradnje, oksidacijsko število, koordinacija vgrajene kovine, katalitska aktivnost produkta) je zagotovo eden najpomembnejših korakov pri razvoju novih katalizatorjev. Zato je bil ključen dosežek programa Nanoporozni materiali tudi to, da smo

razvili lastno ekspertizo in mednarodna sodelovanja za številne karakterizacijske tehnike. Transmisijski elektronski mikroskop skupaj z dušikovimi adsorpcijskimi izotermami in rentgensko difrakcijo je omogočil natančen vpogled v poroznost produktov. Za proučevanje lokalne okolice kovine smo uporabili rentgensko absorpcijsko spektroskopijo, elektronsko paramagnetno in jedrsko magnetno resonanco ter Mössbauerjevo spektroskopijo. Nove katalizatorje z mikroporami, mezoporami in hierarhično poroznostjo testirajo v reakcijah oksidacij na Univerzi Pierre et Marie Curie v Parizu v Franciji v okviru slovensko-francoskega bilateralnega sodelovanja in v laboratorijih evropske mreže odličnosti šestega okvirnega programa INSIDE PORES.

Nadaljevali smo tudi z lastnim razvojem metod za študij strukture nanoporoznih materialov, predvsem z razvojem metod jedrske magnetne resonance. Pokazali smo, da s spektroskopijo fosforjevih jeder lahko preučujemo vgradnjo katalitsko aktivnih centrov Ni, Co, Fe in Mn v aluminofosfatno ogrodje. Natančneje, določimo lahko količino vgrajene prehodne kovine in opišemo njeno porazdelitev po vzorcu. Metoda zaznava hiperfino sklopitev med ioni prehodne kovine in jedri fosforja in je zato komplementarna mnogim drugim tehnikam (XAS, Mössbauerjeva spektroskopija), ki opazujejo le bližnjo okolico prehodne kovine. Komplementarna je tudi spektroskopijama ENDOR in ESEEM, saj za razliko od slednjih omogoča meritve na vzorcih, ki vsebujejo zmerne ali celo zelo velike količine paramagnetnih snovi. Razvili smo tudi metodo za določanje razdalj med dipolno sklopljenimi kvadrupolnimi jedri, npr. med jedri aluminija v aluminofosfatnih in aluminosilikatnih zeolitnih materialih. Metoda temelji na resonanci med jakostjo radiofrekvenčnega magnetnega polja in hitrostjo, s katero se vzorec vrti pod magičnim kotom. Delovanje metode smo predstavili na aluminofosfatnem molekulskem situ $\text{AlPO}_4\text{-14}$, katerega aluminijeva jedra imajo zelo raznolike kvadrupolne sklopitvene konstante in izotropne kemijske premike ter zelo različne razdalje do najbližjih sosedov. Izkazalo se je, da je metoda robustna in da omogoča kvantitativne analize sklopitev med kvadrupolnimi gradniki. Metodo smo nedavno uporabili za študij močno kislih mest, ki zaradi vgrajenega aluminija nastanejo v industrijsko pomembnem zeolitu Y.

Naše znanje o pripravi in karakterizaciji nanoporoznih materialov smo v prakso prenesli na štirih področjih. Z Univerzo v Zagrebu smo preučili možnosti odstranjevanja cinka iz odpadnih galvanskih vod z uporabo naravnih in sintetičnih zeolitov. Z inštitutom Ruđer Bošković iz Zagreba smo definirali postopek za pripravo keramičnih materialov iz zeolitnih prekursorjev. S podjetjem SALONIT smo raziskali hidratacijo cementa brez ali z dodatki apnenca ter reaktivnost elektrofiltrskega pepela in njegovo reakcijo z apnencem. Dobljene rezultate bomo uporabili v nadaljevanju raziskave pri študiju hidratacije ternarnega sistema cement-apnenec-elektrofiltrski pepel. S podjetjem SILKEM smo razvili tehnologijo kompaktiranja praškastih zeolitov, ki omogoča kontinuirano proizvodnjo granulata z nasipno težo do 800 g/L in z velikostjo zrn do 3 mm. Tako pripravljene zeoliti so brezprašne komponente pralnih praškov z znatno izboljšanimi lastnostmi. Naša raziskovalna skupina je vključena v slovensko tehnološko platformo za napredne materiale NaMaT, ki je članica evropske EuMaT, slovensko tehnološko platformo za solarno energijo STTP, ki je članica evropske ESTTP in slovensko gradbeniško tehnološko platformo, članico ustrezne evropske gradbeniške platforme.

3. Ocena stopnje realizacije zastavljenih raziskovalnih ciljev²

Cilji programa Nanoporozni materiali so bili v celoti doseženi.

V okviru programa smo pripravili mnoge s prehodnimi kovinami (Ti, Fe, Mn) modificirane mikroporozne in mezoporozne materiale na fosfatni in silikatni osnovi. V večini materialov so bili ioni prehodnih kovin stabilni in niso izhajali iz ogrodij poroznih materialov.

Pripravili smo tudi kompozitne mikroporozne/mezoporozne materiale, ki so izkazali večjo hidrotermalno stabilnost kot sami mezoporozni materiali. Kompoziti so se med sabo razlikovali po velikosti in ureditvi por in po načinu vključitve mikroporoznih delcev oziroma domen v mezoporozno matriko.

V zadnjem delu programskega obdobja smo začeli pripravljati tudi mezoporozne materiale v obliki tankih plasti in s tem odprli novo področje, ki je zelo zanimivo za mnoge aplikacije.

Vse pripravljene materiale smo temeljito okarakterizirali, natančno določili zgradbo ogrodja in položaj in naravo ionov prehodnih kovin, ki določajo katalitske lastnosti materialov. Opravljenih je bilo tudi precej katalitskih testov.

Še naprej smo intenzivno in uspešno sodelovali s slovensko industrijo, še posebej s podjetji Silkem, Salonit in Krka.

4. Utemeljitev morebitnih sprememb programa raziskovalnega programa³

--

5. Najpomembnejši znanstveni rezultati programske skupine⁴

Znanstveni rezultat			
1.	Naslov	SLO Priprava termično stabilnega mezoporoznega katalizatorja, ki ga je moč reciklirati	
		ANG Synthesis of a thermally stable recyclable mesoporous catalyst	
	Opis	SLO Pripravili smo z manganom modificiran termično stabilen mezoporozen katalizator na silikatni osnovi, MnMCM-41. Pore tega materiala imajo premer okrog 2 nm in so dovolj velike, da bo material moč uporabljati pri katalizi reakcij z molekulami večjih kinetičnih premerov. S pomočjo spektroskopskih metod smo natančno določili naravo in položaj prisotnih katalitsko aktivnih mest ter njihove redoks lastnosti. Le te so posledica vgradnje mangana v silikatno ogrodje. Mangan pri uporabi katalizatorja ne uhaja iz ogrodja, zato bo pripravljeni material mogoče reciklirati.	
		ANG We synthesised a manganese-modified thermally stable mesoporous silica-based catalyst MnMCM-41. Pores of this material have diameter of about 2 nm and are sufficiently large that the material could be employed in catalysis of bulkier molecules. We used several spectroscopic techniques to determine the nature and the location of the catalytically active sites. The determined catalytic properties are due to manganese incorporated into the framework. Manganese does not leach from the framework, which means that the catalyst could be recycled.	
	Objavljeno v	NOVAK TUŠAR, Nataša, ZABUKOVEC LOGAR, Nataša, VLAIC, Gilberto, ARČON, Iztok, ARČON, Denis, DANEU, Nina, KAUČIČ, Venčeslav. Local environment of manganese incorporated in mesoporous MCM-41. Microporous and mesoporous materials, 2005, vol. 82, no. 1, str. 129-136.	
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek	
COBISS.SI-ID	3265050		
2.	Naslov	SLO Priprava katalizatorja, ki združuje prednosti mikroporoznih in mezoporoznih zeolitnih materialov	
		ANG Synthesis of a catalysts that combines advantages of microporous and mesoporous zeolitic materials	
	Opis	SLO Pripravili smo nov mikroporozni/mezoporozni kompozitni material (Ti,Al)-Beta/MCM-48, ki združuje dobre katalitske lastnosti in temperaturno stabilnost mikroporoznega ter dimenzije por mezoporoznega materiala. V prvi fazi priprave smo razvili postopek za vgradnjo izoliranih kationov titana v zeolitne delce nanometrskih razsežnosti. V drugi fazi smo mikroporozne zeolitne nanodelce organizirali v mezoporozno matrico in na ta način res dobili kompozitni material, ki je bolj hidrotermalno stabilen kot čisti mezoporozni materiali MCM-48.	
		ANG We synthesised a new microporous/mesoporous composite material (Ti,Al)-Beta/MCM-48, which combines good catalytic properties and thermal stability of the microporous and large pores of the mesoporous material. In the first step we developed a procedure for the incorporation of titanium cations into zeolitic nanoparticles. In the second step these nanoparticles were arranged into the mesoporous matrix, what yielded a composite material with higher hydrothermal stability than the parent mesoporous MCM-48 material.	
	Objavljeno v	MAZAJ, Matjaž, ZABUKOVEC LOGAR, Nataša, MALI, Gregor, NOVAK TUŠAR, Nataša, ARČON, Iztok, RISTIČ, Alenka, REČNIK, Aleksander, KAUČIČ, Venčeslav. Synthesis and structural properties of titanium containing microporous/mesoporous silicate composite (Ti, Al)-Beta/MCM-48. Microporous and mesoporous materials, 2007, vol. 99, no. 1/2, str. 3-13.	

3.	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek	
	COBISS.SI-ID	3636250	
	Naslov	SLO	Razvoj nove sintezne poti za pripravo kompozitnih materialov
		ANG	Development of a new synthesis route for the preparation of composite materials
	Opis	SLO	V mezoporoznem SBA-15 so tako premeri por kot debeline sten precej večji kot v mezoporoznih materialih tipa MCM, zato smo na tem materialu lahko preskusili nov način priprave kompozita. Namesto da bi mikroporozne nanodelce vgradili v stene mezoporoznega materiala, smo drobna zeolitna zrna preprosto odložili v mezopore vnaprej pripravljenega SBA-15. Tak kompozit ima več prednosti: (i) njegova priprava je enostavna, (ii) modificirani mikroporozni nanodelci v mezoporah so dobro dostopni, (iii) difuzija molekul se ob katalitsko aktivnem zeolitnem zrnu upočasni, kar poveča učinkovitost katalize.
		ANG	In SBA-15 pores are larger and walls are thicker than in mesoporous materials of the MCM family. Therefore, instead of organizing microporous nanoparticles into mesoporous structures, we were able to simply deposit tiny zeolitic grains into the pores of the pre-synthesized SBA-15. Such a composite material has some advantages: (i) its preparation is simple (ii) metal-modified microporous nanoparticles within mesopores are easily accessible, (iii) diffusion of molecules slows down in the vicinity of the zeolitic grain, which increases the catalytic efficiency.
	Objavljeno v	MAZAJ, Matjaž, STEVENS, Wesley J.J., ZABUKOVEC LOGAR, Nataša, RISTIČ, Alenka, NOVAK TUŠAR, Nataša, ARČON, Iztok, DANEU, Nina, MEYNEN, Vera, COOL, Pegie, VANSANT, Etienne F., KAUCIČ, Venčeslav. Synthesis and structural investigations on aluminium-free Ti-Beta/SBA-15 composite. Microporous and mesoporous materials, 2009, vol. 117, no. 1/2, str. 458-465.	
4.	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek	
	COBISS.SI-ID	4066074	
	Naslov	SLO	Priprava mezoporoznih aluminofosfatnih tankih plasti
		ANG	Preparation of mesoporous aluminophosphate thin films
	Opis	SLO	Doslej poznani mezoporozni aluminofosfati imajo po večini pore razporejene v heksagonalni sklad. Take pore so med sabo vzporedne, in ker vse potekajo v isti smeri, je v praksi notranjost delcev slabo dostopna molekulam. Uspeli smo pripraviti dva kubična aluminofosfatna mezoporozna materiala, v katerih pore potekajo vzdolž treh pravokotnih si smeri. Zaradi take razporeditev por in zaradi njihovih okrog 10 nanometrskih premerov, sta materiala zelo obetavna. Pripravili smo ju tako v obliki prahu kot v obliki tankih filmov s tipično debelino okrog 500 nm.
		ANG	In mesoporous aluminophosphate materials pores are usually arranged in a hexagonal stack. Such pores are all parallel and because they all point into the same direction, the interior of the material is in practice poorly accessible to molecules. We prepared two cubic aluminophosphate materials with pores running along three mutually orthogonal axes. Because of different pore arrangement and because of their 10 nm large diameters, the materials are very promising. Moreover, the materials were not only prepared as powders but also as thin films with the thickness of about 500 nm.
	Objavljeno v	MAZAJ, Matjaž, COSTACURTA, Stefano, ZABUKOVEC LOGAR, Nataša, MALI, Gregor, NOVAK TUŠAR, Nataša, INNOCENZI, Plinio, Malfatti, Luca, THIBAUT-STARZYK, Frederic, AMENITSCH, Heinz, KAUCIČ, Venčeslav, SOLLER-ILLIA, G.J.A.A. Mesoporous aluminophosphate thin films with cubic pore arrangement. Langmuir, 2008, vol. 24, no. 12, str. 6220-6225.	
5.	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek	
	COBISS.SI-ID	3950362	
	Naslov	SLO	Razvoj metode jedrske magnetne resonance za študij zgradbe trdnin
		ANG	Development of nuclear magnetic resonance methods for the investigation of structural details of solids
			Predstavili smo učinkovito metodo jedrske magnetne resonance, s katero lahko v trdnih vzorcih študiramo sklopitve med kvadrupolnimi jedri s spinom 3/2 (npr. ^{23}Na), 5/2 (npr. ^{27}Al), 7/2 itd. Metoda temelji na resonanci med

Opis	SLO	jakostjo radiofrekvenčnega magnetnega polja in hitrostjo, s katero se vzorec vrti pod magičnim kotom. Delovanje metode smo demonstrirali na aluminofosfatnem molekulskem situ AlPO ₄ -14 in pokazali, da je metoda robustna in da omogoča kvantitativno določanje razdalj med kvadrupolnimi gradniki.
	ANG	We presented an efficient method for studying proximities between dipolar-coupled half-integer quadrupolar nuclei. The method is based on the resonance between the strength of the radiofrequency magnetic field and the spinning speed of the sample. Performance of the method was demonstrated on AlPO ₄ -14, in which aluminium nuclei have diverse quadrupolar coupling constants and isotropic shifts, and different distances to nearest neighbours. We have shown that the method was robust and that it allowed quantitative analysis of distances among quadrupolar constituents.
Objavljeno v	MALI, Gregor, FINK, Gerhard, TAULELLE, Francis. Double-quantum homonuclear correlation magic angle sample spinning nuclear magnetic resonance spectroscopy of dipolar-coupled quadrupolar nuclei. J. chem. phys., 2004, vol. 120, no. 6, str. 2835-2845.	
Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek	
COBISS.SI-ID	2978842	

6. Najpomembnejši družbeno-ekonomsko relevantni rezultati programske skupine⁵

Družbeno-ekonomsko relevantni rezultat		
1.	Naslov	SLO Vabljen predavanja na mednarodnih kongresih
		ANG Invited lectures at international conferences
	Opis	SLO Raziskovalci programske skupine so predstavili svoje delo na več kot desetih vabljenih predavanjih na mednarodnih konferencah. Taka predavanja imajo poleg strokovnega pomena tudi velik vpliv na prepoznavnost slovenske znanosti in slovenskih znanstveno-raziskovalnih inštitucij in skupin. Eno pomembnejših vabljenih predavanj je bilo predavanje profesorja Kaučiča 'Characterization of microporous and mesoporous solids using complementary diffraction and X-ray absorption spectroscopic techniques' na '4th International FEZA conference' leta 2008 v Parizu.
		ANG Members of the programme group presented their work in more than 10 invited lectures at international congresses. Such lectures are important not only for their scientific contents but also because they enable presentation of slovenian science and of slovenian research institutions and groups. One of the above mentioned lectures was, for example, a lecture 'Characterization of microporous and mesoporous solids using complementary diffraction and X-ray absorption spectroscopic techniques' given by professor Kaučič at the '4th International FEZA conference' in 2008 in Paris.
	Šifra	B.04 Vabljen predavanje
	Objavljeno v	KAUČIČ, Venčeslav, ZABUKOVEC LOGAR, Nataša, ARČON, Iztok. Characterisation of microporous and mesoporous solids using complementary diffraction and X-ray absorption spectroscopic techniques. V: 2nd International FEZA school, September 1-2, 2008, Paris. Characterization techniques for zeolites and related materials : state of the art and recent developments. [S.l.: s.n.], 2008, str. 91-123.
	Tipologija	1.06 Objavljeni znanstveni prispevek na konferenci (vabljen predavanje)
	COBISS.SI-ID	3992602
2.	Naslov	SLO Sodelovanje v študijskih procesih
		ANG Teaching
	Opis	SLO Sodelavci programske skupine pomagamo pri dodiplomskem in podiplomskem raziskovalnem delu študentov Fakultete za kemijo in kemijsko tehnologijo. Poleg tega smo nosilci večih predmetov podiplomskih študijskih programov na omenjeni fakulteti in na Fakulteti za podiplomski študij Univerze v Novi Gorici. Predmeti Heterogeni katalizatorji, Kristalografija, Jedrska magnetna resonanca v trdnem in Kemija omogočajo podiplomskim

		študentom spoznavanje s pomembno skupino materialov in s karakterizacijskimi tehnikami, ki jih lahko s pridom uporabljajo pri raziskavah trdnih snovi na raznih področjih.
	ANG	Our reserach group participates intensively in the research oriented training of students at graduate and postgraduate level. Additionally, several members of the group are giving lectures at the Faculty of chemistry and chemical technology at the University of Ljubljana, and at the Faculty for postgraduate studies at the University of Nova Gorica. Lessons in Heterogeneous catalysts, Crystallography, Solid-state nuclear magnetic resonance, and Chemistry allow post graduate students to learn about new materials and about powerful characterization techniques.
Šifra	D.10	Pedagoško delo
Objavljeno v	MAZAJ, Matjaž. Sinteza in strukturne značilnosti nanoporoznih silikatov in aluminofosfatov : doktorska disertacija. Ljubljana: [M. Mazaj], 2008. VII, 118 f., ilustr., tabele.	
Tipologija	2.08	Doktorska disertacija
COBISS.SI-ID	242205184	
3. Naslov	SLO	Aplikativne raziskave v sodelovanju s podjetjem Salonit
	ANG	Applied oriented research in collaboration with Salonit Anhovo
Opis	SLO	Sodelovanje s Salonitom je usmerjeno v raziskave cementov z mineralnimi dodatki. Elektrofiltrski pepel in apnenec kot dodatka omogočata zmanjšan obseg proizvodnje klinkerja ter posledično izdelavo cementa z dodatki, ki v postopku izdelave zahteva manjšo množino energije ter znatno manj obremenjuje okolje s toplogrednim plinom CO ₂ . Raziskave cementov z mineralnimi dodatki vključujejo raziskave poteka in kinetike hidratacije ternarnega sistema cement-pepel-apnenec ter raziskave lastnosti in karakteristik nastalih faz ter celotnega hidratiziranega sistema na mikro- in nanometriškem območju.
	ANG	The active cooperation with Salonit Anhovo has focused on the research of blended cements in the past years. The uses of fly ash and limestone enable the decrease of clinker production; the resulting blended cement altogether includes less energy-intensive production process and lower emissions of greenhouse gas CO ₂ into the environment. The research on hydration of ternary blended cements focuses on the characterization and properties of phases formed as well as on the extensive characterization of the entire hydrated system on micro- and nanoscale levels.
Šifra	F.04	Dvig tehnološke ravni
Objavljeno v	Poslovna skrivnost.	
Tipologija	2.12	Končno poročilo o rezultatih raziskav
COBISS.SI-ID	4136730	
4. Naslov	SLO	Razvoj tehnologije kompaktiranja zeolita za podjetje Silkem
	ANG	Development of technology for compacting zeolite - collaboration with Silkem
Opis	SLO	S podjetjem Silkem iz Kidričevega smo razvili tehnologijo kompaktiranja praškastih zeolitov, ki omogoča kontinuirano proizvodnjo granulata z nasipno težo do 800 g/L in z velikostjo zrn do 3 mm. Tako pripravljeni zeoliti so brezprašne komponente pralnih praškov z znatno izboljšanimi lastnostmi. Za Silkem kompaktiran zeolit predstavlja pomemben nov in kvaliteten produkt, s katerim so odgovorili na zahteve proizvajalcev pralnih praškov in vstopili na trg nekaterih drugih produktov (npr. damskih vložkov in produktov Assorbio za odstranjevanje vonjav v gospodinjskih hladilnikih).
	ANG	In collaboration with Silkem we have developed an industrial procedure for the synthesis and compaction of zeolites X and P. The compacted materials are typical, non-dusting components of modern washing powders and they exhibit considerably improved physico-chemical and washing properties. They also contain a higher content of washing-active substances. An important health-related aspect of compacted products is their low possibility for causing allergic reactions and other harmful influences. The new technological process of compaction is not limited to a washing powder industry materials.
Šifra	F.09	Razvoj novega tehnološkega procesa oz. tehnologije

5.	Objavljeno v		Poslovna skrivnost.
	Tipologija		2.13 Elaborat, predštudija, študija
	COBISS.SI-ID		000000000
	Naslov	SLO	
		ANG	
	Opis	SLO	
		ANG	
	Šifra		
	Objavljeno v		
	Tipologija		
	COBISS.SI-ID		

7. Pomen raziskovalnih rezultatov programske skupine⁶

7.1. Pomen za razvoj znanosti⁷

SLO

Namen programa Nanoporozni materiali je bil razvoj stabilnih katalizatorjev z večjimi porami (s premerom 2 nm in več). Taki katalizatorji naj bi omogočali na primer okolju prijaznejši katalitski krekning višjih ogljikovodikov ali proizvodnjo zdravil in drugih farmacevtskih učinkovin. Pri doseganju tega cilja smo preskusili več poti. Pripravili smo več s prehodnimi kovinami modificiranih mezoporoznih materialov na silikatni in aluminofosfatni osnovi. Čeprav so bili ioni prehodnih kovin večinoma stabilno vgrajeni v ogrodja in niso izhajali iz le teh, sami materiali še vedno niso dosegali tako visoke hidrotermalne stabilnosti, kakršno izkazujejo mikroporozni zeolitni materiali. Zato smo pripravili tudi več kompozitnih mikro/mezoporoznih materialov in s tem res uspeli povečati obstojnost teh potencialnih katalizatorjev. Pri kompozitnih materialih smo opozorili na možnost priprave, kjer kompozita ne sintetiziramo tako, da koloidni raztopini zeolitnih nanodelcev dodamo surfaktante, ki navadno tvorijo micelle in vodijo do nastanka mezoporoznih materialov, ampak zeolitne nanodelce enostavno odložimo v pore vnaprej pripravljenega in kalciniranega mezoporoznega materiala. Pokazali smo, da je taka priprava kompozita enostavnejša, kot je bila priprava kompozitov dotlej. Ne glede na to, po kateri poti pripravljamo kompozite, pa je zelo pomembno poznavanje nastajanja zeolitnih nanodelcev, saj moramo hidrotermalno sintezo le teh ustaviti ob pravem času, ko so zeolitna zrna še dovolj majhna, a po drugi strani imajo karakteristično stabilno zgradbo. Ta ugotovitev je spodbudila študij nastajanja zeolitov.

Doslej poznani mezoporozni aluminofosfati imajo po večini pore razporejene v heksagonalni sklad. Take pore so med sabo vzporedne, in ker vse potekajo v isti smeri, je v praksi notranjost delcev slabo dostopna molekulam. V naši programski skupini smo uspeli pripraviti dva kubična aluminofosfatna mezoporozna materiala, v katerih pore potekajo vzdolž treh pravokotnih si smeri. Zaradi take razporeditve por in zaradi njihovih okrog 10 nanometrskih premerov, sta materiala zelo obetavna. Pripravili smo ju tako v obliki prahu kot v obliki tankih filmov s tipično debelino okrog 500 nm. Prav priprava mezoporoznih tankih plasti – filmov pa odpira nova področja uporabe teh materialov. V naši programski skupini že nadaljujemo z raziskavami v smeri funkcionalizacije oziroma modifikacije filmov.

Pomembni so bili tudi nekateri dosežki na področju razvoja NMR metodologije. Vpeljali smo metodo jedrske magnetne resonance, s katero lahko v trdnih vzorcih študiramo sklopitve med kvadrupolnimi jedri s spinom 3/2 (npr. ^{23}Na), 5/2 (npr. ^{27}Al), 7/2 itd. Metoda temelji na resonanci med jakostjo radiofrekvenčnega magnetnega polja in hitrostjo, s katero se vzorec vrtil pod magičnim kotom. Delovanje metode smo demonstrirali na aluminofosfatnem molekulskem situ $\text{AlPO}_4\text{-14}$ in pokazali, da je metoda robustna in da omogoča kvantitativno določanje razdalj med kvadrupolnimi gradniki. Metoda smo nedavno uporabili za proučevanje vloge izvenogrodniških aluminijevih kationov pri nevtralizaciji negativno nabitega zeolitnega ogrodja v industrijsko izjemno pomembnem zeolitu Y. Seveda pa je metoda uporabna za karakterizacijo vseh trdnih materialov, ki vsebujejo kvadrupolna jedra, in ne le aluminofosfatnih in aluminosilikatnih zeolitnih materialov. Na podlagi našega prispevka se je nekaj skupin lotilo dela na področju t.i. metod za študij homonuklearnih sklopitev med kvadrupolnimi jedri.

ANG

The purpose of the programme Nanoporous materials was the development of stable catalysts with larger pores (with diameters of 2 nm and more). Such catalysts should, for example, enable environment friendly catalytic cracking of higher hydrocarbons or synthesis of pharmaceutical substances. We prepared several transition-metal-modified materials on the silicate and phosphate basis. Although the transition-metal ions were predominantly stable within the framework and their leaching was not detected, the materials themselves were still not as hydrothermally stable as are microporous zeolitic materials. Therefore we also synthesised several composite microporous/mesoporous materials and indeed succeeded to increase the stability of these potential catalysts. We compared two different ways of preparation of composites. In one way we first prepared colloidal solution of zeolitic nanoparticles and then added surfactants, which got arranged into micelles and directed the formation of mesoporous material with microporous domains included. In another way we used already prepared mesoporous material with thicker walls and larger pores and we simply deposited zeolitic nanoparticles into the pores of the mesoporous material. We pointed out that the second way of preparation was simpler and should be favourable. Irrespectively of the way of preparation of composites, knowledge of the formation of zeolitic particles is very important for the successful synthesis. The hydrothermal process leading to microporous zeolites namely has to be stopped as soon as grains with typical zeolitic framework are formed, so that these grains are still small enough. This requirement induced studies of zeolite formation and crystal growth.

Pores of mesoporous aluminophosphate materials were up to now arranged mostly in a hexagonal stack. Such pores are all parallel and because they all point into the same direction, the interior of the material is in practice poorly accessible to molecules. In our programme group we managed to prepare two cubic aluminophosphate materials with pores running along three mutually orthogonal axes. Because of different pore arrangement and because of their 10 nm large diameters, the materials are very promising. The materials were prepared as powders and as thin films with a thickness of about 500 nm. Such films open many new application opportunities. Within our group we already continue investigation with the aim to functionalize or to modify thin films.

We also presented some new developments in the field of solid-state nuclear magnetic resonance spectroscopy. For example, we introduced a method for studying proximities between dipolar-coupled quadrupolar nuclei, e.g. between aluminium nuclei within aluminophosphate and aluminosilicate zeolitic materials. The method is based on the resonance between the strength of the radiofrequency magnetic field and the spinning speed of the sample. Performance of the method was demonstrated on aluminophosphate molecular sieve AIPO₄-14, in which aluminium nuclei have diverse quadrupolar coupling constants and isotropic shifts, and different distances to nearest neighbours. We have shown that the method was robust and that it allowed quantitative analysis of distances among quadrupolar constituents. The method was recently used for studying aluminium-generated enhanced acid sites in industrially important zeolite Y. Of course, the method can be employed also for investigations of other solids that contain quadrupolar nuclei. Based on the method presented by our group, several European research groups followed up with research in the field of homonuclear couplings among quadrupolar nuclei.

7.2. Pomen za razvoj Slovenije⁸

SLO

Znanost o nanoporoznih materialih je v zdajšnjem obdobju v polnem razmahu, čeprav praktični potenciali, ki jih taki materiali ponujajo, še zdaleč niso ustrezno uporabljeni v praksi. Programska skupina programa Nanoporozni materiali deluje že devet let. V tem času se je uvrstila med vodilne skupine v Evropi na področju modificiranja nanoporoznih materialov s kovinami. Sodelovala je v okviru evropskega centra odličnosti INSIDE PORES ter v centru odličnosti ESRR Nanoznanosti in nanotehnologije.

Naše znanje o pripravi in karakterizaciji nanoporoznih materialov smo v prakso prenesli na več področjih. Z Univerzo v Zagrebu in slovenskim podjetjem SILKEM iz Kidričevega smo razvili postopek odstranjevanja cinka iz odpadnih galvanskih vod z uporabo naravnih in sintetičnih zeolitov. S podjetjem SILKEM smo razvili tudi tehnologijo kompaktiranja praškastih zeolitov, ki omogoča kontinuirano proizvodnjo granulata z nasipno težo do 800 g/L in z velikostjo zrn do 3 mm. Tako pripravljeni zeoliti so brezprašne komponente pralnih praškov z znatno izboljšanimi lastnostmi. Razširitev proizvodnje z novimi okolju prijaznimi nanoporoznimi materiali je pomembno pripomogla k boljši konkurenčnosti podjetja na evropskih trgih. S podjetjem SALONIT Anhovo smo raziskali hidratacijo cementa brez ali z dodatki apnenca ter reaktivnost elektrofilrskega pepela in njegovo reakcijo z apnencem. Dobljene rezultate bomo uporabili v

nadaljevanju raziskave pri študiju hidratacije ternarnega sistema cement-apnenec-elektrofiltrski pepel. Naša raziskovalna skupina je vključena v slovensko tehnološko platformo za napredne materiale NaMaT, ki je članica evropske EuMaT, slovensko tehnološko platformo za solarno energijo STTP, ki je članica evropske ESTTP in slovensko gradbeniško tehnološko platformo, članico ustrezne evropske gradbeniške platforme.

Naloga programske skupine je bila tudi vzgoja mladih kadrov na področju anorganske sinteze in karakterizacije materialov. Prof. Venčeslav Kaučič je na podiplomski stopnji s predmetom Heterogeni katalizatorji na Fakulteti za kemijo in kemijsko tehnologijo na Univerzi v Ljubljani prenašal izkušnje iz raziskovalnega dela v izobraževalni proces. Prav tako so trije doktorji znanosti, habilitirani na Univerzi Nova Gorica, poučevali na dodiplomskem in na podiplomskih študijskih programih na področju znanosti o materialih. V okvir programa je bilo z raziskovalnim delom vključenih več mladih raziskovalcev in dodiplomskih študentov.

Programska skupina je močno vpeta v slovenski raziskovalni prostor. Sodeluje z drugimi programskimi skupinami na Kemijskem inštitutu, še posebej s tistimi, ki delujejo na področju materialov (Laboratorij za elektrokemijo materialov, Laboratorij za infrardečo spektroskopijo materialov, NMR center, Laboratorij za katalizo). Prav tako se povezuje s programskimi skupinami na Inštitutu Jožef Stefan, na Fakulteti za kemijo in kemijsko tehnologijo na Univerzi v Ljubljani in na Fakulteti za znanosti o okolju in Fakulteti za podiplomski študij na Univerzi Nova Gorica.

ANG

The science of nanoporous materials is nowadays in its full swing although many advantages have not yet been adequately exploited and successfully transformed into practice. Our programme group has been active for nine years. Over this period it became one of the leading groups in the field of preparation of metal-modified nanoporous materials in Europe. Since 2004 we were included into the FP6 European Network of Excellence INSIDE PORES and into an ERDF centre of excellence Nanoscience and nanotechnologies.

We transferred our knowledge on preparation and characterisation of nanoporous materials to several fields of application. With the University of Zagreb and Slovenian company SILKEM from Kidričevo we explored the possibilities for the removal of zinc from wastewaters of galvanic industry using natural and synthetic zeolites as adsorbents. Together with SILKEM we also developed a technological process for the compaction of silicate products. The expansion of the production significantly improved the competitiveness of the company in the European markets. With SALONIT Anhovo we defined the influences of soluble carbonates on the overall hydration, final phase development and composition of Portland cement. Further long-term cooperation will be focused on the study of the kinetics of the ternary system Portland cement-limestone-fly ash to formulate an optimal composition with the highest resistance against sulphate corrosion. Our research group got included into Slovenian Technology Platform NaMaT, a member of European EuMaT, and Slovenian Thermosolar Technology Platform STTP, a member of European ESTTP.

Another mission of the group was education and training of young researchers in the field of inorganic synthesis and characterization of materials. Within the postgraduate course on Heterogeneous catalysts at the Faculty of Chemistry and Chemical Technology of University of Ljubljana professor Venčeslav Kaučič has transferred knowledge and experiences from scientific research to educational process. Another three researchers from the group have delivered courses in the field of material science at the undergraduate and postgraduate level at University of Nova Gorica. Several young researchers and undergraduate students have been included in the frame of the programme Nanoporous materials.

The programme group is tightly bound to research environment of Slovenia. We cooperate with other programme groups at the National Institute of Chemistry, especially with the ones that are active in the materials area (Laboratory for electrochemistry of materials, Laboratory for infrared spectroscopy of materials, Laboratory for catalysis and NMR centre). We also cooperate with programme groups located at the Jožef Stefan Institute (Laboratory for microscopy of materials), Faculty of Chemistry and Chemical Technology, University of Ljubljana (Department of inorganic chemistry) and School of Environmental Sciences, University of Nova Gorica (Laboratory for environmental applications).

8. Zaključena mentorstva članov programske skupine pri vzgoji kadrov⁹

		Od tega
--	--	---------

Vrsta izobraževanja	Število mentorstev	mladih raziskovalcev
- magisteriji		
- doktorati	3	3
- specializacije		
Skupaj:	3	3

9. Zaposlitev vzgojenih kadrov po usposabljanju

Organizacija zaposlitve	Število doktorjev	Število magistrov	Število specializantov
- univerze in javni raziskovalni zavodi	1		
- gospodarstvo	2		
- javna uprava			
- drugo			
Skupaj:	3	0	0

10. Opravljeno uredniško delo, delo na informacijskih bazah, zbirkah in korpusih v obdobju¹⁰

	Ime oz. naslov publikacije, podatkovne informacijske baze, korpusa, zbirke z virom (ID, spletna stran)	Število *
1.	Acta Chimica Slovenica (V. Kaučič član uredniškega odbora od leta 1998 dalje)	
2.	International Journal of Molecular Sciences (V. Kaučič član uredniškega odbora od 2001 do 2006)	
3.	Microporous and Mesoporous Materials (V. Kaučič član uredniškega odbora od leta 2003 dalje)	
4.	Gradnja z betoni visokih zmogljivosti: zbornik gradiv in referatov (urednik A. Zajc)	
5.	Novosti pri gradnji tlakov: zbornik gradiv in referatov (urednik A. Zajc)	
6.	Agregati v betonu: zbornik gradiv in referatov (urednik A. Zajc)	
7.	Posebne lastnosti betonov z dodatki: zbornik gradiv in referatov (urednik A. Zajc)	
8.		
9.		
10.		

*Število urejenih prispevkov (člankov) /število sodelavcev na zbirki oz. bazi /povečanje obsega oz. število vnosov v zbirko oz. bazo v obdobju

11. Vključenost raziskovalcev iz podjetij in gostovanje raziskovalcev, podoktorandov ter študentov iz tujine, daljše od enega meseca

Sodelovanje v programski skupini	Število
- raziskovalci-razvijalci iz podjetij	
- uveljavljeni raziskovalci iz tujine	1
- podoktorandi iz tujine	

- študenti, doktorandi iz tujine	5
Skupaj:	6

12. Vključevanje v raziskovalne programe Evropske unije in v druge mednarodne raziskovalne in razvojne programe ter drugo mednarodno sodelovanje v obravnavanem obdobju¹¹

- Projekt šestega okvirnega programa Evropske unije (2004-2008), INSIDE-PORES Network of Excellence
- Projekt MNT ERA-Net, A Swedish-Slovenian Nano-Battery Network SVEN-SLO-BATT (2007-2009)
- Evropski projekt On-site investigation techniques for the structural evaluation of historic masonry buildings, ONSITEFORMASONRY, Contract No. EVK4-CT-2001-00060 (2001-2004)
- Projekt ESRR - Evropski sklad za regionalni razvoj (2004-2007), Nanoscience and nanotechnology centre of excellence, Characterization on nanometric scale
- Projekt ESRR - Evropski sklad za regionalni razvoj (2004-2007), NMR centre of excellence, Study of structures and interactions in biotechnology and pharmacy
- Projekt Eureka E!2345: Group of Advanced Materials for the Durable Repair and Rehabilitation of Damaged Industrial Floors (2000-2005)
- COST D 19 Chemical Functionality Specific to the Nanometer Scale (2000-2006)
- COST D 36 Molecular Structure-Performance Relationships at the Surface of Functional Materials (2006-2011)
- Enoletna podoktorska štipendija Marie Curie (MCFI-2002-00811, 2003-2004) na Univerzi v Trstu in na sinhrotronu ELETTRA v Trstu (Nataša Novak Tušar)
- Trimesečna podoktorska štipendija CNRS na Inštitutu Lavoisier v Versaillesu v Franciji.
- Polletna doktorska štipendija Ad futura (znanstveno izobraževalna fundacija Republike Slovenije) za izpopolnjevanje na CNEA, Buenos Aires, Argentina.
- Dvomesečna doktorska štipendija evropske mreže odličnosti INSIDE PORES za izpopolnjevanje na Univerzi v Antwerpnu v Belgiji.
- Trimesečna doktorska štipendija Francoskega inštituta Charles Nodier za izpopolnjevanje v laboratoriju za katalizo v Caenu v Franciji.
- Slovensko-argentinski bilateralni projekt (2006-2008) Modified Mesoporous Oxides
- Slovensko-norveški bilateralni projekt (2007-2009) Smart Porous Composite Materials
- Slovensko-francoski projekt PROTEUS (2007-2008) Hierarchical Nanoporous Catalysts: Synthesis, Characterization and Catalytic Performances
- Slovensko-francoski projekt PROTEUS (2005-2006) Measuring homonuclear distances between quadrupolar nuclei
- Slovensko-madžarski bilateralni projekt (2006-2007) Characterization of Iron Modified Nanoporous Silicates
- Slovensko-srbski bilateralni projekt (2004-2007) By Rational Synthesis towards Smart Materials, Tehnološko-metalurška fakulteta, Beograd, Srbija
- Slovensko-hrvaški bilateralni projekt (2005-2006), Institut "Ruđer Bošković", Zagreb, Hrvaška
- Partnership in Science (2004) - A study of crystal growth mechanisms in zeolitic materials by atomic force microscopy, University of Manchester
- Partnership in Science (2005) - Study of crystal growth in new metal-modified zeolitic materials by atomic force microscopy, University of Manchester
- Partnership in Science (2007) - Structural Properties of Metal-Organic Frameworks as Potential Hydrogen Storage Materials, University of Manchester
- Program sodelovanja med Slovenijo in Veliko Britanijo v okviru sporazuma o znanstvenem sodelovanju med SAZU in The Royal Society (od 2001 dalje)
- Eksperimentalni projekti na sinhrotronu ELETTRA (2006600, 2007356) XAS studies of Ti, V, Mn and Fe local environment of hierarchical porous catalysts
- Slovensko-norveški bilateralni projekt (2007 - 2009) High performance fibre reinforce concrete and their use in the practice, s SINTEF Building and Infrastructure, Concrete, Trondheim

13. Vključenost v projekte za uporabnike, ki potekajo izven financiranja ARRS¹²

1. Neposredna industrijska pogodba med KRKO in KI (II/20-106 259/2006)
 2. Neposredna industrijska pogodba med KRKO in KI (II/20-106 259/2007 in aneks za leto 2008)
 3. Neposredna industrijska pogodba med SALONIT Anhovo in KI (95/06-L04/L09)
 4. Neposredna industrijska pogodba med SALONIT Anhovo in KI (67/07-L04/L09)
 5. Neposredna industrijska pogodba med SILKEM Kidričevo in KI (1/2003)
 6. Eksperimentalni projekti na sinhrotronu ELETTRA, Trst, Italija:
 - XAS studies Ti, Mn, Fe local environment of catalysts for oxidation reactions (številka projekta: 2005247), 2005
 - XAS studies of Ti, V, Mn and Fe local environment of hierarchical porous catalysts (številke projektov: 2006600, 2007356, 2007591), 2006-2008.
- (Ko je projekt odobren, raziskovalni skupini merilnega časa na sinhrotronu ni treba plačati. Stroške nastanitve, poti in dnevnic krije EU na osnovi programa Transnational Access Procedure for Travel Expense Refunds to EU Users v okviru 6. okvirnega programa)

14. Dolgoročna sodelovanja z uporabniki, sodelovanje v povezavah gospodarskih in drugih organizacij (grozdi, mreže, platforme), sodelovanje članov programske skupine v pomembnih gospodarskih in državnih telesih (upravni odbori, svetovalna telesa, fundacije, itd.)

- Programska skupina je vključena
- v slovensko tehnološko platformo za napredne materiale NaMaT, ki je članica evropske EuMaT (Nataša Novak Tušar je članica izvršnega odbora),
 - v slovensko tehnološko platformo za solarno energijo STTP, ki je članica evropske ESTTP,
 - v slovensko gradbeniško tehnološko platformo, ki je članica Evropske gradbeniške tehnološke platforme
 - in v Slovenski gradbeni grozd.
- Prof. Venčeslav Kaučič je
- od leta 1997 vodja raziskovalno-razvojne skupine v SILKEM d.o.o.,
 - predsednik znanstvenega sveta Slovenske znanstvene fundacije (tretji mandat),
 - od leta 1996 predsednik Slovenskega kemijskega društva,
 - bil je predsednik Nacionalnega znanstveno-raziskovalnega sveta pri ARRS (2005)
 - bil je predsednik znanstveno-raziskovalnega sveta za področje naravoslovja in matematike pri ARRS (od 2004 do 2005; od 2000 do 2004 član tega sveta)
 - bil je član IUPAC Division Committee of Inorganic Chemistry (2001 do 2005)
 - bil je član IUPAC Union Advisory Committee-ja (2004 do 2005)
 - bil je član IUPAC Streamlining Committee-ja (2006 - 2007)
 - je član Finance and Audit Committee-ja Evropske znanstvene fundacije (od 2006)
 - je član COST CMST (Chemistry, Molecular Sc. and Technol.) Committee-ja (od 1999)
 - bil je član komisije za državne nagrade v znanosti (Zoisove nagrade) (2000 do 2004)

15. Skrb za povezavo znanja s slovenskim prostorom in za slovensko znanstveno terminologijo (Cobiss tip 1.04, 1.06, 1.07, 1.08, 1.09, 1.17, 1.18, 2.02, 2.03, 2.04, 2.05, 2.06)¹³

Naslov	Kemija, nanoporozni materiali, katalizatorji
Opis	V poglavju je opisana posebnost mikroporoznih/mezoporoznih kompozitov kot heterogenih katalizatorjev, ki združujejo uporabne lastnosti mikroporoznih in mezoporoznih materialov. Takšni materiali imajo veliko prednost v kemijskih reakcijah, kjer sodelujejo molekule večjih kinetičnih premerov, so okolju prijazni in se enostavno reciklirajo. Opisana je sinteza materialov tako v praškasti obliki kot v obliki tankih filmov. Porozni materiali z velikostjo delcev v območju 10-700 nm so namreč zanimivi tudi kot reaktivne membrane, optični premazi, dielektrične plasti in selektivni kemični senzorji.

Objavljeno v	NOVAK TUŠAR, Nataša, ZABUKOVEC LOGAR, Nataša, KRAJNC, Peter. Kemija, nanoporozni materiali, katalizatorji. V: NAVODNIK, Janez (ur.). Slovenija je ustvarjena za nanotehnologije : izdelki in tehnologije prihodnosti. 1. izd. Celje: Navodnik, 2007, str. 158-168.
COBISS.SI-ID	11483926

16. Skrb za popularizacijo znanstvenega področja (Cobiss tip 1.05, 1.21, 1.22, 2.17, 2.19, 3.10, 3.11, 3.12)¹⁴

Naslov	Nanoporozni materiali za čistejšo tehnologijo
Opis	V prispevkih je podan pregled nanoporoznih materialov ter najnovejše smernice pri njihovem razvoju in uporabi. Poudarek je na nanoporoznih katalizatorjih in adsorbentih ter njihovi vlogi pri uporabi čistejših goriv, na primer vodika, in v industrijskih procesih, ki bi zmanjšali porabo energije, proizvodnjo odpadkov in uporabo korozivnih, eksplozivnih, hlapnih in biološko nerazgradljivih materialov. Predstavljeni so zeoliti in zeolitom podobni mikroprozni in mezoporozni materiali z urejenim sistemom por ter kovinsko-organski kristalinični porozni materiali.
Objavljeno v	ZABUKOVEC LOGAR, Nataša, KAUČIČ, Venčeslav. Nanoporozni materiali za čistejšo tehnologijo. 1. del. Kem. šoli, 2006, let. 18, št. 4, str. 9-16.
COBISS.SI-ID	3633434

17. Vpetost vsebine programa v dodiplomske in podiplomske študijske programe na univerzah in samostojnih visokošolskih organizacijah v letih 2004 – 2008

1.	Naslov predmeta	Heterogeni katalizatorji
	Vrsta študijskega programa	podiplomski
	Naziv univerze/fakultete	UL / FKKT
2.	Naslov predmeta	Kristalografija
	Vrsta študijskega programa	podiplomski
	Naziv univerze/fakultete	UNG / Fakulteta za podiplomski študij
3.	Naslov predmeta	Kemija
	Vrsta študijskega programa	podiplomski
	Naziv univerze/fakultete	UNG / Fakulteta za podiplomski študij
4.	Naslov predmeta	Jedrska magnetna resonanca v trdnem
	Vrsta študijskega programa	podiplomski
	Naziv univerze/fakultete	UNG / Fakulteta za podiplomski študij
	Naslov predmeta	Kemija in kemijska tehnika

5.	Vrsta študijskega programa	dodiplomski
	Naziv univerze/fakultete	UNG / Poslovno tehnična fakulteta
6.	Naslov predmeta	Kemija
	Vrsta študijskega programa	dodiplomski
	Naziv univerze/fakultete	UL / BTF
7.	Naslov predmeta	Gradiva
	Vrsta študijskega programa	dodiplomski
	Naziv univerze/fakultete	UL / NTF

18. Označite potencialne vplive oziroma učinke vaših rezultatov na navedena področja:

	Vpliv	Ni vpliva	Majhen vpliv	Srednji vpliv	Velik vpliv	
G.01	Razvoj visoko-šolskega izobraževanja					
G.01.01.	Razvoj dodiplomskega izobraževanja	☐	☐	☐	☐	
G.01.02.	Razvoj podiplomskega izobraževanja	☐	☐	☐	☐	
G.01.03.	Drugo:	☐	☐	☐	☐	
G.02	Gospodarski razvoj					
G.02.01	Razširitev ponudbe novih izdelkov/storitev na trgu	☐	☐	☐	☐	
G.02.02.	Širitev obstoječih trgov	☐	☐	☐	☐	
G.02.03.	Znižanje stroškov proizvodnje	☐	☐	☐	☐	
G.02.04.	Zmanjšanje porabe materialov in energije	☐	☐	☐	☐	
G.02.05.	Razširitev področja dejavnosti	☐	☐	☐	☐	
G.02.06.	Večja konkurenčna sposobnost	☐	☐	☐	☐	
G.02.07.	Večji delež izvoza	☐	☐	☐	☐	
G.02.08.	Povečanje dobička	☐	☐	☐	☐	
G.02.09.	Nova delovna mesta	☐	☐	☐	☐	
G.02.10.	Dvig izobrazbene strukture zaposlenih	☐	☐	☐	☐	
G.02.11.	Nov investicijski zagon	☐	☐	☐	☐	
G.02.12.	Drugo:	☐	☐	☐	☐	
G.03	Tehnološki razvoj					
G.03.01.	Tehnološka razširitev/posodobitev dejavnosti	☐	☐	☐	☐	

G.03.02.	Tehnološko prestrukturiranje dejavnosti	☐	☐	☐	☐	
G.03.03.	Uvajanje novih tehnologij	☐	☐	☐	☐	
G.03.04.	Drugo:	☐	☐	☐	☐	
G.04	Družbeni razvoj					
G.04.01	Dvig kvalitete življenja	☐	☐	☐	☐	
G.04.02.	Izboljšanje vodenja in upravljanja	☐	☐	☐	☐	
G.04.03.	Izboljšanje delovanja administracije in javne uprave	☐	☐	☐	☐	
G.04.04.	Razvoj socialnih dejavnosti	☐	☐	☐	☐	
G.04.05.	Razvoj civilne družbe	☐	☐	☐	☐	
G.04.06.	Drugo:	☐	☐	☐	☐	
G.05.	Ohranjanje in razvoj nacionalne naravne in kulturne dediščine in identitete	☐	☐	☐	☐	
G.06.	Varovanje okolja in trajnostni razvoj	☐	☐	☐	☐	
G.07	Razvoj družbene infrastrukture					
G.07.01.	Informacijsko-komunikacijska infrastruktura	☐	☐	☐	☐	
G.07.02.	Prometna infrastruktura	☐	☐	☐	☐	
G.07.03.	Energetska infrastruktura	☐	☐	☐	☐	
G.07.04.	Drugo:	☐	☐	☐	☐	
G.08.	Varovanje zdravja in razvoj zdravstvenega varstva	☐	☐	☐	☐	
G.09.	Drugo:	☐	☐	☐	☐	

Komentar¹⁵

Raziskovalci iz projektne skupine smo v okviru visokošolskega izobraževanja ponudili kvalitetne dodiplomske in podiplomske predmete, katerih tematika ni ozko vezana na samo usmeritev raziskovalnega programa, ampak ponuja osnovna znanja za karakterizacijo novih materialov.

H gospodarskemu razvoju smo prispevali preko sodelovanja s SILKEMOM, SALONITOM in KRKO. Pri prvem smo skozi daljše obdobje sodelovanja pomagali pri razvoju in optimizaciji tehnologije za izdelavo novih produktov (zeolitov tipa X in P, kompaktiran zeolit). S tem je podjetje razširilo svojo ponudbo in doseglo nove trge, postalo še konkurenčnejše in povečalo dobiček. Pri drugem pomagamo pri bolj temeljnih raziskavah, ki zadevajo hidratacijo novih cementov, ki jih v podjetju razvijajo in pripravljajo.

Materiali, ki jih razvijamo, bodo pomagali k izvedbi okolju-prijaznejših katalitskih reakcij. Predstavili smo dve temeljiti študiji o uporabi naravnih zeolitov pri čiščenju odpadnih vod. Zaključujemo tudi raziskave o uporabi zeolitov pri čiščenju pitne vode.

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

Zaključno poročilo o rezultatih raziskovalnega programa v obdobju 2004-2008

potrebe ocenjevanja, za objavo 5., 6. in 7. točke na spletni strani <http://sicris.izum.si/> ter obdelavo teh podatkov za evidence ARRS

- so vsi podatki v obrazcu v elektronski obliki identični podatkom v obrazcu v pisni obliki

Podpisi:

vodja raziskovalnega programa		zastopniki oz. pooblaščen osebe raziskovalnih organizacij in/ali koncesionarjev
Venčeslav Kaučič	in/ali	Kemijski inštitut
		IRMA, inštitut za raziskavo materialov in aplikacije, d.o.o.

Kraj in datum:

Ljubljana

17.4.2009

Oznaka poročila: ARRS_ZV_RPROG_ZP_2008/931

¹ Napišite kratko vsebinsko poročilo, kjer boste predstavili raziskovalno hipotezo in opis raziskovanja. Navedite ključne ugotovitve, znanstvena spoznanja ter rezultate in učinke raziskovalnega programa. Največ 21.000 znakov vključno s presledki (približno tri in pol strani, velikosti pisave 11). [Nazaj](#)

² Največ 3000 znakov vključno s presledki (približno pol strani, velikosti pisave 11). [Nazaj](#)

³ Samo v primeru bistvenih odstopanj in sprememb od predvidenega programa raziskovalnega programa, kot je bil zapisan v predlogu raziskovalnega programa. Največ 3.000 znakov vključno s presledki (približno pol strani, velikosti pisave 11). [Nazaj](#)

⁴ Navedite največ pet najpomembnejših znanstvenih rezultatov programske skupine, ki so nastali v času trajanja programa v okviru raziskovalnega programa, ki je predmet poročanja. Za vsak rezultat navedite naslov v slovenskem in angleškem jeziku (največ 150 znakov vključno s presledki), rezultat opišite (največ 600 znakov vključno s presledki) v slovenskem in angleškem jeziku, navedite, kje je objavljen (največ 500 znakov vključno s presledki), izberite ustrezno šifro tipa objave po Tipologiji dokumentov/del za vodenje bibliografij v sistemu COBISS ter napišite ustrezno COBISS.SI-ID številko bibliografske enote.

Navedeni rezultati bodo objavljeni na spletni strani <http://sicris.izum.si/>.

PRIMER (v slovenskem jeziku):

Naslov: Regulacija delovanja beta-2 integrinskih receptorjev s katepsinom X;

Opis: Cisteinske proteaze imajo pomembno vlogo pri nastanku in napredovanju raka. Zadnje študije kažejo njihovo povezanost s procesi celičnega signaliziranja in imunskega odziva. V tem znanstvenem članku smo prvi dokazali... (največ 600 znakov vključno s presledki)

Objavljeno v: OBERMAJER, N., PREMŽL, A., ZAVAŠNIK-BERGANT, T., TURK, B., KOS, J.. Carboxypeptidase cathepsin X mediates $\beta 2$ - integrin dependent adhesion of differentiated U-937 cells. Exp. Cell Res., 2006, 312, 2515-2527, JCR IF (2005): 4.148

Tipologija: 1.01 - Izvirni znanstveni članek

COBISS.SI-ID: 1920113 [Nazaj](#)

⁵ Navedite največ pet najpomembnejših družbeno-ekonomsko relevantnih rezultatov programske skupine, ki so nastali v času trajanja programa v okviru raziskovalnega programa, ki je predmet poročanja. Za vsak rezultat navedite naslov v slovenskem in angleškem jeziku (največ 150 znakov vključno s presledki), rezultat opišite (največ 600 znakov vključno s presledki) v slovenskem in angleškem jeziku, izberite ustrezen rezultat, ki je v Šifrantu raziskovalnih rezultatov in učinkov (Glej: <http://www.arrs.gov.si/sl/gradivo/sifranti/sif-razisk-rezult.asp>), navedite, kje je rezultat objavljen (največ 500 znakov vključno s presledki), izberite ustrezno šifro tipa objave po Tipologiji dokumentov/del za

Zaključno poročilo o rezultatih raziskovalnega programa v obdobju 2004-2008

vodenje bibliografij v sistemu COBISS ter napišite ustrezno COBISS.SI-ID številko bibliografske enote. Navedeni rezultati bodo objavljeni na spletni strani <http://sicris.izum.si/>. [Nazaj](#)

⁶ Pomen raziskovalnih rezultatov za razvoj znanosti in za razvoj Slovenije bo objavljen na spletni strani: <http://sicris.izum.si> [Nazaj](#)

⁷ Največ 4.000 znakov vključno s presledki [Nazaj](#)

⁸ Največ 4.000 znakov vključno s presledki [Nazaj](#)

⁹ Za raziskovalce, ki niso habilitirani, so pa bili mentorji mladim raziskovalcem, se vpiše ustrezen podatek samo v stolpec MR [Nazaj](#)

¹⁰ Vpisuje se uredništvo revije, monografije ali zbornika v skladu s Pravilnikom o kazalcih in merilih znanstvene in strokovne uspešnosti (Uradni list RS, št. 39/2006, 106/2006 in 39/2007), kar sodi tako kot mentorstvo pod sekundarno avtorstvo, in delo (na zlasti nacionalno pomembnim korpusu ali zbirki) v skladu z 3. in 9. členom istega pravilnika. Največ 1000 znakov (ime) oziroma 150 znakov (število) vključno s presledki. [Nazaj](#)

¹¹ Navedite oziroma naštejite konkretne projekte. Največ 12.000 znakov vključno s presledki. [Nazaj](#)

¹² Navedite konkretne projekte, kot na primer: industrijski projekti, projekti za druge naročnike, državno upravo, občine ipd. in ne sodijo v okvir financiranja pogodb ARRS. Največ 9.000 znakov vključno s presledki. [Nazaj](#)

¹³ Navedite objavo oziroma prevod (soobjavo) članov programske skupine strokovnega prispevka v slovenskem jeziku, ki se nanaša na povezavo znanja s slovenskim prostorom in za slovensko znanstveno terminologijo (Cobiss tip 1.04, 1.06, 1.07, 1.08, 1.09, 1.17, 1.18, 2.02, 2.03, 2.04, 2.05, 2.06). Napišite naslov (največ 150 znakov vključno s presledki), kratek opis (največ 600 znakov vključno s presledki), navedite, kje je objavljen/a (največ 500 znakov vključno s presledki) ter napišite ustrezno COBISS.SI-ID številko bibliografske enote. [Nazaj](#)

¹⁴ Navedite objavo oziroma prevod (soobjavo) članov programske skupine, povezano s popularizacijo znanosti (Cobiss tip 1.05, 1.21, 1.22, 2.17, 2.19, 3.10, 3.11, 3.12). Napišite naslov (največ 150 znakov vključno s presledki), kratek opis (največ 600 znakov vključno s presledki), navedite, kje je objavljen/a (največ 500 znakov vključno s presledki), ter napišite ustrezno COBISS.SI-ID številko bibliografske enote. [Nazaj](#)

¹⁵ Komentar se nanaša na 18. točko in ni obvezen. Največ 3.000 znakov vključno s presledki. [Nazaj](#)

Obrazec: ARRS-ZV-RPROG-ZP/2008 v1.00a