

Oznaka poročila: ARRS-RPROG-ZP-2015/169



## ZAKLJUČNO POROČILO O REZULTATIH RAZISKOVALNEGA PROGRAMA

(za obdobje 1. 1. 2009 - 31. 12. 2014)

### A. PODATKI O RAZISKOVALNEM PROGRAMU

#### 1. Osnovni podatki o raziskovalnem programu

<b>Šifra programa</b>	P1-0021
<b>Naslov programa</b>	Nanoporozni materiali Heterogeneous Catalysts
<b>Vodja programa</b>	14120 Nataša Zabukovec Logar
<b>Obseg raziskovalnih ur (vključno s povečanjem financiranja v letu 2014)</b>	46133
<b>Cenovni razred</b>	C
<b>Trajanje programa</b>	01.2009 - 12.2014
<b>Izvajalci raziskovalnega programa (javne raziskovalne organizacije - JRO in/ali RO s koncesijo)</b>	104 Kemijski inštitut 1013 IRMA, inštitut za raziskavo materialov in aplikacije, d.o.o.
<b>Raziskovalno področje po šifrantu ARRS</b>	1 NARAVOSLOVJE 1.04 Kemija
<b>Družbeno-ekonomski cilj</b>	13.01 Naravoslovne vede - RiR financiran iz drugih virov (ne iz SUF)
<b>Raziskovalno področje po šifrantu FOS</b>	1 Naravoslovne vede 1.04 Kemija

### B. REZULTATI IN DOSEŽKI RAZISKOVALNEGA PROGRAMA

#### 2. Povzetek raziskovalnega programa<sup>1</sup>

SLO

Delo v okviru programa je bilo osredotočeno na razvoj naprednih poroznih adsorbentov in katalizatorjev za uporabo v okoljsko in energijsko naprednih procesih,

kot so oksidacijske metode čiščenja vode in zraka (AOP), shranjevanje toplotne energije in plinov, ter za razvoj poroznih dostavnih sistemov za nadzorovano sproščanje zdravilnih učinkovin. Materiali, ki smo jih proučevali so bili mikroporozni in mezoporozni silikati in aluminosilikati, mikroporozni aluminofosfati, kovinsko-organski porozni materiali (MOF-i) ter njihovi analogi modificirani/funkcionalizirani s prehodnimi in drugimi kovinami. Del raziskav v okviru programa je bil posvečen študijam optimizacije strukture cementov v sodelovanju z industrijskim partnerjem. Priprava in optimizacija materialov z želenimi lastnostmi je bila podprta z natančno strukturno karakterizacijo z metodami rentgenske difrakcije, jedrske magnetne resonance, elektronske mikroskopije in drugimi metodami. Posebno pozornost smo namenili tudi raziskavam sorpcijskih in katalitskih procesov v materialih za preverjanje možnosti končne uporabe ter in-situ raziskavam kristalizacije materialov. Sintezo izbranih materialov, ki so bili zanimivi na laboratorijskem nivoju in so ustrezali zahtevanim kriterijem za uporabo smo preverili tudi na polindustrijskem nivoju v sodelovanju z dvema ključnima industrijskima partnerjema. Dobra raziskovalna oprema in znanje so omogočili izobraževanje več doktorskih študentov (dva doktorata sta bila nagrajena s Preglovo nagrado za izjemno doktorsko delo). Z dobrim delom v okviru programa smo okrepili mednarodna prepoznavnosti članov programske skupine na področju sinteze in karakterizacije nanoporoznih materialov (več vabljenih predavanj na mednarodnih konferencah, članki z visokimi IF, funkcije v mednarodnih znanstvenih združenjih), ter pridobili nove izkušnje pri vodenju domačih in mednarodnih projektov (npr. EUREKA in ERA-NET projekti).

ANG

Research work in the scope of the program was focused on the development of advanced porous adsorbents and catalysts for their use in environmental and energy applications, such as advanced oxidation processes for water and air cleaning (AOP), the storage of thermal energy and gasses, as well as for the development of porous drug delivery systems for the controlled release of active substances. The studied materials were microporous and mesoporous silicates and aluminosilicates, microporous aluminophosphates, metal-organic framework materials (MOFs), and their analogues modified/functionalized with transition and other metals. Part of the research in the scope of the program was devoted to the study of optimization of the structure of cement in collaboration with an industrial partner. Preparation and optimization of materials with desired properties has been supported by precise structural characterization by using X-ray diffraction methods, nuclear magnetic resonance, electron microscopy and other methods. Special attention was devoted to the studies of sorption and catalytic processes in materials for their possible application and in-situ crystallisation studies. Synthesis of selected materials that were very promising at the laboratory scale and met the required criteria for application, we also checked on a semi-industrial level, in collaboration with two key industrial partners. Good research equipment and expertise have enabled excellent training for several doctoral students (two doctorates were awarded by Pregl Award for outstanding doctoral work). With the work in the frame of the program we did strengthen the international recognition of program group members in the fields of synthesis and characterisation of nanoporous materials (several invited lectures at international conferences, articles with high IF and functions in international scientific associations), as well as gained new experience in managing national and international projects (e.g. EUREKA and ERA-NET projects).

### **3.Poročilo o realizaciji predloženega programa dela na raziskovalnem programu, (vključno s predloženim dopolnjenim programom dela v primeru povečanja financiranja raziskovalnega programa v letu 2014)<sup>2</sup>**

SLO

V okviru programa smo v preteklih petih letih raziskovali porozne adsorbente za ločevanje in shranjevanje plinov in za shranjevanje toplote ter okolju prijazne

porozne katalizatorje. Posebno pozornost smo posvečali njihovim strukturnim značilnostim in kristalizacijskim mehanizmom. Strukturne značilnosti ključno določajo učinkovitost omenjenih materialov, s študijem kristalizacijskih mehanizmov pa smo želeli ugotoviti, na kakšen način in do katere mere lahko vplivamo na nastanek materialov z želenimi lastnostmi za izbrano aplikacijo, t.j. na velikost in razporeditev por, vrsto in razporeditev aktivnih mest v materialih, na njihovo hidrotermično stabilnost, idr. V okviru programa smo proučevali tudi možnosti uporabe poroznih materialov za odstranjevanje arzena in težkih kovin iz vode ter hidratacijo sistema Portland cement-apnenec-elektrofiltrski pepel z namenom določiti optimalno sestavo z najvišjo zaščito proti sulfatni koroziji.

Na področju okolju prijaznih katalizatorjev smo razvili vrsto novih poroznih silikatov funkcionaliziranih z manganom, titanom, železom in bakrom. V prvi skupini sintetiziranih katalizatorjev so bile porozne matrike nosilci kovinskih nanodelcev, v drugi skupini pa smo kovinske ione vgradili v porozna ogrodja. Osredotočili smo se na stabilne in inertne silikatne materiale z veliko specifično površino in z velikimi porami, ki omogočajo dobro dostopnost do katalitskih mest molekulam, ki vstopajo v katalitske reakcije. Za zelo primerni matriki sta se izkazala silikatna materiala SBA-15 in KIL-2. Nove katalizatorje z različno vsebnostjo posameznih kovin smo testirali v katalitskih reakcijah, s katerimi razgrajujemo strupena organska onesnažila v vodi in v zraku. Pokazali smo, da z manganom funkcionalizirani silikatni nanodelci delujejo kot odlični katalizator in v 30 minutah pri sobni temperaturi v nevtralni vodni raztopini oksidativno do ogljikovega dioksida razgradijo kar 80 % modelnega organskega onesnažila. Ugotovili smo, da so visoko aktivni le delci, ki vsebujejo v silikatno ogrodje vgrajen mangan. S testnimi reakcijami smo dokazali tudi izredno učinkovitost z železom in bakrom funkcionaliziranih mezoporoznih silikatov za razgradnjo toluena v plinski fazi. Pokazali smo, da imajo najvišjo katalitsko aktivnost vzorci z izoliranimi železovimi ioni v silikatni matriki. V sistemu titanovih silikatov smo pripravili učinkovit katalizator za razgradnjo lahkih organskih spojin iz zraka, ki ga že preizkušamo za uporabo pri čiščenju notranjih prostorov.

Na področju razvoja materialov za shranjevanje plinov in toplote smo razvili več novih učinkovitih mikroporoznih adsorbentov na osnovi zeolitov, aluminofosfatov ter kovinsko-organskih poroznih ogrodij. Posebno pozornost smo posvetili pripravi hidrotermično stabilnih materialov, ki bi omogočili širšo uporabo. Za shranjevanje H<sub>2</sub> in CO<sub>2</sub> smo sintetizirali porozne železove, aluminijeve, titanove in cirkonijeve karboksilate s specifičnimi površinami do 4000 m<sup>2</sup>/g, ki lahko vežejo do 7 ut% vodika in do 30 ut.% ogljikovega dioksida. Izbrane materiale smo posintetsko modificirali z nikljevimi in magnezijevimi kompleksi in na ta način občutno izboljšali interakcije plinskih molekul s poroznimi matrikami, kar je ključno za končno uporabo v hranilnikih vodika v avtomobilih in za ločevanje CO<sub>2</sub> iz mešanice plinov (npr. iz dimnih plinov). Za shranjevanje toplote smo razvili dva mikroporozna aluminofosfata z visoko kapaciteto. Material APO-TRIC, ki veže in sprošča celotno količino vode v območju relativnih tlakov 0.1-0.4, kar je najprimernejše za uporabo v toplotnih črpalkah in hranilnikih toplote, je do sedaj edini poznani material s takšnim idealnim sorpcijskim režimom. Pojasnili smo, kakšna je povezava med strukturnimi in sorpcijskimi lastnostmi materiala, in podali smernice za načrtovano sintezo materialov za shranjevanje toplote. Med več sintetiziranimi kovinsko-organskimi poroznimi materiali je pokazal največji potencial za shranjevanje toplote aluminijev karboksilat MIL-100. Poleg sorpcije plinov v porozne matrike smo v okviru programa proučevali tudi vezavo zdravilnih učinkovin v pore mezoporoznih silikatov (MCM-41, SBA-15) in kovinsko-organskih poroznih materialov (tipa MIL-101 in MIL-53). S kombinacijo eksperimentalnega dela in modeliranja smo pokazali, kako velikost por in jakost privlačnih interakcij med stenami poroznega nosilca in molekulami zdravila v porah vplivata na potek sproščanja zdravila iz poroznega silikata kot dostavnega sistema za zdravilno učinkovino. Z meritvami z jedrsko magnetno resonanco smo raziskali več različnih dostavnih sistemov in pokazali, da se prav s to metodo da pridobiti informacije o razporeditvi molekul v porah in o interakcijah med molekulami zdravila in nosilcem. Kot modelno učinkovino smo največ študirali indometacin,

poskusno pa smo v mezoporozne silikate vgradili tudi druge zdravilne učinkovine.

Pri raziskavah sorpcije arzena in težkih kovin na naravne zeolite in zeolit 4A (proizvajalec Silkem, d.o.o. iz Kidričevega) smo ugotovili, da so materiali izredno učinkoviti pri imobilizaciji bakrovih, železovih, manganovih, kromovih, nikljevih in arzenovih specij iz vode. Tako smo iz modelnih vodnih raztopin uspeli odstraniti vse kovinske ione do koncentracije 1 mg/L v nekaj minutah. Pokazali smo, da je mogoče zeolit z imobiliziranimi kovinami po uporabi popolnoma regenerirati z obdelavo v razredčenih raztopinah kislin in amonijevih soli. Raziskali smo tudi mineraloško sestavo hidratiziranih cementnih veziv z nižjim ogljičnim odtisom in pojasnili nastanek karbonatno-aluminatnih faz pri hidrataciji cementnih veziv z apnencem. Podrobno smo preučevali vpliv sestave aluminatnih hidratov v cementni matrici na interakcije s kloridnimi in sulfatnimi ioni. Poznavanje preučevanih mehanizmov kemijskih reakcij je pomembno, ker ti v veliki meri določajo obstojnost jeklene armature v betonu in odpornost betona proti sulfatni koroziji.

V letu 2014 so bila programu odobrena dodatna sredstva v višini 223 raziskovalnih ur, ki so bila namenjena predvsem raziskavam na dveh področjih, in sicer pripravi kompozitov kovinsko-organskih poroznih materialov s polimeri v obliki monolitov ali membran za uporabo v katalizi in selektivni adsorpciji, ter razvoju metod NMR kristalografije. Rezultate dela pri pripravi kompozitov smo že zbrali v članku, ki je v postopku objave. Prvi rezultati dela na področju NMR kristalografije so tudi že v fazi priprave članka.

#### **4. Ocena stopnje realizacije programa dela na raziskovalnem programu in zastavljenih raziskovalnih ciljev<sup>3</sup>**

SLO

Raziskovalne cilje, ki smo si jih v okviru programa Nanoporozni materiali zadali za obdobje 2009-2014, smo v celoti dosegli. Razvili smo nove okolju prijazne porozne katalizatorje, materiale za shranjevanje toplote in plinov, materiale za dostavne sisteme zdravilnih učinkovin, za učinkovito odstranjevanje arzena in težkih kovin iz pitne in odpadnih vod ter pripomogli k razumevanju hidratacije cementnih materialov. Uspešno smo nadaljevali tudi razvoj in optimizacijo karakterizacijskih metod in tehnik, predvsem na področju povezovanja NMR spektroskopije in računskih metod. Posebno izstopajo rezultati na področju razvoja okolju prijaznih katalizatorjev, kjer smo bili osredotočeni na pripravo učinkovitih materialov za procese čiščenja zraka in vode s katalitsko oksidacijo. Slednja predstavlja enega od najuspešnejših procesov za popolno razgradnjo organskih spojin do CO<sub>2</sub> in H<sub>2</sub>O. Sintetizirali smo več katalizatorjev, kjer so kovine prehoda v oksidni obliki imobilizirane na primernih nosilcih ali vgrajene v porozne silikatne matrike in so cenovno ugodnejša alternativa trenutno uporabljenim katalizatorjem, ki vsebujejo žlahtne kovine. Z raziskavami smo ugotovili, da sta narava/tip nosilca in uporabljena metoda imobilizacije kovinskih delcev najpomembnejša faktorja, ki določata učinkovitost in trajnost katalizatorja, in ki ju lahko v veliki meri uspešno nadzorujemo. S katalitskimi testi v modelnih raztopinah barvil in lahkih organskih spojin smo nedvoumno pokazali izreden potencial pripravljenih materialov za uporabo v naprednih oksidacijskih postopkih razgradnje organskih onesnažil. Prav tako izstopajo rezultati raziskav na področju adsorbentov, to je materialov za shranjevanje toplote in plinov, kjer smo bili osredotočeni na anorganske in kovinsko-organske porozne materiale. Pokazali smo, da je mogoče sistematično vplivati na dejavnike, ki določajo gostoto shranjene energije izbranih adsorbentov s sintetskimi in posintetskimi metodami. Na najbolj obetavnih materialih smo opravili teste adsorpcije-desorpcije vode (shranjevanje toplote), adsorpcije-desorpcije vodika (shranjevanje vodika) in adsorpcije-desorpcije ogljikovega dioksida (ločevanje plinov in shranjevanje CO<sub>2</sub>) ter dokazali visoke kapacitete in primerne jakosti vezave plinov. Na področju dostavnih sistemov zdravilnih učinkovin smo pokazali, da je za razumevanje delovanja teh sistemov zelo pomembno pridobiti mikroskopski vpogled v razporeditev molekul v pore nosilca in

raziskati interakcije med molekulami učinkovine in nosilcem. Metoda, ki tak vpogled omogoča, je jedrska magnetna resonanca. Je namreč spektroskopska metoda, ki nudi informacijo o lokalni okolici atomskih jeder, in je še posebej primerna za študij motivov, ki ne kažejo reda dolgega dosega. Je tudi občutljiva na interakcije med atomi (zazna vodikove vezi, omogoča vsaj kvalitativno ocenjevanje razdalj med atomi, v primeru paramagnetnih materialov velikokrat nudi informacijo o naravi vezi – kovalentna/ionska).

#### 5.Utemeljitev morebitnih sprememb programa raziskovalnega programa oziroma sprememb, povečanja ali zmanjšanja sestave programske skupine v letu 2014<sup>4</sup>

SLO

Dodatna sredstva, ki so bila programu namenjena v letu 2014 (223 raziskovalnih ur) so bila uspešno uporabljena raziskavam kompozitov kovinsko-organskih poroznih materialov s polimeri v obliki monolitov ali membran za uporabo v katalizi in selektivni adsorpciji ter razvoju metod NMR kristalografije, saj je en članek že v objavi, drugi pa v pripravi. V prvem članku smo uspešno imobilizirali, sicer hidrotermalno neobstoječe oblike kovinsko-organskih poroznih materialov v polimerno matriko, ki je bila oblikovana v obliki monolita ter preverili katalitsko aktivnost materiala, ki je bila primerljiva s praškastimi analogi. Za slednje (praškasta oblika) velja, da niso primerni za končno uporabo v reaktorjih, medtem ko v granulirani ali monolitni obliki so.

#### 6.Najpomembnejši znanstveni rezultati programske skupine<sup>5</sup>

		Znanstveni dosežek	
1.	COBISS ID	36300805	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Spektroskopski dokaz strukturno-usmerjevalne vloge topila v sintezi dveh železovih karboksilatov
		ANG	Spectroscopic evidence for the structure directing role of the solvent in the synthesis of two iron carboxylates
	Opis	SLO	Razumevanje kristalizacijskega mehanizma je ključnega pomena za načrtovanje novih struktur kovinsko-organskih poroznih materialov (MOF-ov) z zelenimi lastnostmi za določeno uporabo, na primer za shranjevanje toplote in plinov, ločevanje plinov, dostavljanje zdravilnih učinkovin, katalizo, itd. Zato je izjemno pomembna določitev temeljnih gradnikov in/ali vmesnih faz pri nastanku MOFov, kar še vedno predstavlja velik eksperimentalni izziv. Avtorji članka so študirali sočasni nastanek dveh poroznih železovih karboksilatov z uporabo rentgenske absorpcijske (XAS) in Mössbauerjeve spektroskopije. Z natančnim študijem različnih stopenj sinteze, od raztopin do končnih kristaliničnih produktov, jim je uspelo dokazati, da prisotnost aprotičnega topila (acetona) spremeni mehanizem nastanka spojin že v prvih stopnjah sinteze (t.j. tip in strukturo osnovnih gradnikov ter oksidacijsko stanje železa pri povišanih temperaturah), v primerjavi s čisto vodno raztopino. To je prva raziskava, v kateri je bila natančno določena vloga topila pri sintezi MOF-ov z analizo lokalne strukture atomov v raztopinah in gelih prekurzorjev.
		ANG	The understanding of crystallization mechanism is crucial for a rational design of new metal-organic (MOF) porous materials with desired properties for specific applications, like heat and gas storage, gas separations, drug delivery, catalysis, etc. The detection the fundamental building blocks of growth and/or intermediate phases is thus of profound interest, but appears to be a great experimental challenge. Authors of the paper have studied the competitive formation of two porous iron carboxylates by using X-ray absorption (XAS) and Mössbauer spectroscopies. By detailed investigation of different stages of synthesis from solution to the formation of final crystalline products, they succeeded

		to demonstrate how the presence of aprotic solvent (acetone) changed the formation mechanism from the very first beginning of the synthesis (type and structure of primary building blocks, oxidation state of iron at elevated temperatures) if compared with pure water solution. It is the first study that evaluates the role of the solvent in the MOF formation process by analysing the local structure of species that are present in the precursor solution and gel.
	Objavljeno v	Wiley-VCH; Angewandte Chemie; 2012; Vol. 51, iss. 50; str. 12490-12494; Impact Factor: 13.734; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 3.175; A <sup>''</sup> : 1; A <sup>'</sup> : 1; WoS: DY; Avtorji / Authors: Birsa Čelič Tadeja, Rangus Mojca, Lazar Karoly, Kaučič Venčeslav, Zabukovec Logar Nataša
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek
2.	COBISS ID	4910618 Vir: COBISS.SI
	Naslov	<p>SLO Uporabnost mikroporoznega aluminofosfata z majhnimi porami pri nizkotemperaturnem shranjevanju sončne energije – odvisnost adsorpcijskih lastnosti od strukture</p> <p>ANG The performance of small-pore microporous aluminophosphates in low-temperature solar energy storage</p>
	Opis	<p>SLO Avtorji smo razvili mehanizem, s katerim lahko predvidimo potencial za shranjevanje toplote za številne znane in nove strukture mikroporoznih materialov. Uporaba reverzibilne kemijske in fizikalne vezave vode v trdne materiale ponuja nov koncept za dolgoročno skladiščenje toplotne energije, tudi v kombinaciji s sončnimi kolektorji, vendar do sedaj ni bilo sistematične študije o možnih mehanizmih za izboljšanje shranjevalnih lastnosti z optimizacijo materialov. S primerjalno termogravimetrično in kalorimetrično študijo sorpcije vode v aluminofosfatne materiale z majhnimi porami (SAPO34, AIPO418 in APOTric) smo pokazali, da je formiranje visoko urejenih vodnih klastrov gonilna sila za nenadno sorpcijo vode v ozkem tlačnem območju, kar je potrebno za uporabo v shranjevalnih sistemih oziroma je bistveno za učinkovito shranjevanje toplote. Nastanek klastrov omogočajo hitre in reverzibilne spremembe v koordinaciji ogrodnih aluminijevih atomov in optimalen premer por.</p> <p>ANG The authors have developed a mechanism that predicts the heat storage potential of numerous known or new microporous aluminophosphates. The utilisation of the reversible chemical and physical sorption of water on solids provides a new long-term thermal energy storage concept, also in combination with solar thermal collectors. However, up to now there have been no systematic studies of the possible mechanisms for heat storage enhancement concerning materials optimisation. Based on a comparative thermogravimetric and calorimetric study of water sorption in small-pore aluminophosphate materials (SAPO34, AIPO418 and APOTric) the authors proposed that the formation of highly ordered water clusters in the pores is a driving force for a sudden water uptake in a narrow relative pressure range, which is a prerequisite for their use in storage systems and crucially determines their sorption efficiency. The formation of clusters is enabled by rapid and reversible changes in the framework aluminium coordination and optimal pore diameters.</p>
	Objavljeno v	Wiley Interscience; Advanced functional materials; 2012; Vol. 22, iss. 9; str. 1952-1957; Impact Factor: 9.765; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.402; A <sup>''</sup> : 1; A <sup>'</sup> : 1; WoS: DY, EI, NS, PM, UB, UK; Avtorji / Authors: Ristić Alenka, Zabukovec Logar Nataša, Henninger Stefan K., Kaučič Venčeslav
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek
3.	COBISS ID	4863514 Vir: COBISS.SI

Naslov	SLO	Razvoj novega katalizatorja za katalitsko čiščenje odpadnih vod
	ANG	A discovery of novel catalyst for catalytic wastewater purification
Opis	SLO	Katalitska oksidacija z vodikovim peroksidom WHPCO (Wet Hydrogen Peroxide Catalytic Oxidation) predstavlja enega od industrijsko zelo uporabnih naprednih oksidacijskih procesov za razgradnjo organskih onesnažil v vodi. V navedenem članku smo opisali nov in okolju prijazen, cenovno ugoden ter visoko učinkovit katalizator za katalitsko čiščenje odpadnih vod. Pokazali smo, da z manganom funkcionalizirani silikatni nanodelci delujejo v WHPCO procesu kot katalizator in v 30 minutah pri sobni temperaturi ter nevtralnem pH vrednosti vodne raztopine oksidativno razgradijo (do ogljikovega dioksida) kar 80 % modelnega organskega onesnažila. S strukturno karakterizacijo materiala z rentgensko absorpcijsko spektroskopijo in katalitskimi testi smo dokazali, da so visoko aktivni le nanodelci, ki vsebujejo v silikatno ogrodje vgrajen mangan, ne pa nanodelci, v katerih je mangan prisoten v obliki oksidov (Mn <sub>3</sub> O <sub>4</sub> ali Mn <sub>2</sub> O <sub>3</sub> ). Material predstavlja novo družino katalizatorjev za napredne oksidacijske procese, ki razgrajujejo organska onesnažila v vodi.
	ANG	Wet hydrogen peroxide catalytic oxidation (WHPCO) is one of the most promising industrially applicable advanced oxidation processes for the decomposition of organic pollutants in water. In this article we presented a novel and environmentally friendly, cost-effective as well as highly efficient catalyst for catalytic wastewater purification. We demonstrated that manganese functionalized silicate nanoparticles act as a superior catalyst in WHPCO, since they can completely decompose and convert to carbon dioxide 80 % of a test organic compound in 30 minutes at neutral pH and room temperature. By performing structural characterization of the material using X-ray absorption spectroscopic techniques and catalytic tests, it was also proven that the superior activity of the catalyst can be attributed uniquely to the manganese incorporated into silicate framework of nanoparticles, and not to manganese in the form of manganese oxides (Mn <sub>3</sub> O <sub>4</sub> , Mn <sub>2</sub> O <sub>3</sub> ). The presented material thus introduces a new family of catalysts, which possess superior efficiency for the decomposition of organic pollutants dissolved in water.
Objavljeno v	Wiley Interscience; Advanced functional materials; 2012; Vol. 22, issue 4; str. 820-826; Impact Factor: 9.765; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.402; A'': 1; A': 1; WoS: DY, EI, NS, PM, UB, UK; Avtorji / Authors: Novak Tušar Nataša, Maučec Darja, Rangus Mojca, Arčon Iztok, Mazaj Matjaž, Cotman Magda, Pintar Albin, Kaučič Venčeslav	
Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek	
4. COBISS ID	5150746	Vir: COBISS.SI
Naslov	SLO	Z železom funkcionalizirani silikatni nanodelci kot zelo učinkoviti adsorbenti in katalizatorji za oksidacijo toluena v plinski fazi
	ANG	Iron-functionalized silica nanoparticles as a highly efficient adsorbent and catalyst for toluene oxidation in the gas phase
Opis	SLO	Z železom funkcionalizirani silikatni nanodelci z mezoporoznostjo med delci (FeKIL-2) delujejo kot visoko učinkovit adsorbent in katalizator za oksidacijo toluena v plinski fazi. Z uporabo UV/VIS, FTIR, in Mössbauerjeve spektroskopije smo dokazali, da lahko povečano aktivnost katalizatorja pripišemo vgradnji izoliranih železovih ionov v silikatno matriko. Vsebnost železa glede na Si $Fe/Si \leq 0,01$ vodi do tvorbe stabilnih Fe <sup>3+</sup> ionov v silikatni matriki, ki zagotavlja lažje sproščanje kisika iz katalizatorja (Fe <sup>3+</sup> /Fe <sup>2+</sup> redoks cikla). Povečanje vsebnosti železa ( $Fe/Si > 0,01$ ) vodi do tvorbe večjedrnih železovih kompleksov. Pripravljeni material predstavlja obetaven, okolju prijazen, poceni in visoko učinkovit katalizator za odstranjevanje nizkih koncentracij lahkih organskih onesnaževal iz

		zraka.
	ANG	Iron-functionalized silica nanoparticles with inter-particle porosity (FeKIL-2) do act as a highly efficient adsorbent and catalyst for the oxidation of toluene in the gas phase. By using UV/Vis, FTIR, and Mössbauer spectroscopic techniques, we proved that the enhanced activity of the catalyst is attributed to the iron incorporated into the silica matrix and depends on the iron content. The iron content with $Fe/Si \leq 0.01$ leads to the formation of stable $Fe^{3+}$ ions in the silica matrix, which ensures easier oxygen release from the catalyst ( $Fe^{3+}/Fe^{2+}$ redox cycles). The increase in the iron content with $Fe/Si > 0.01$ leads to the formation of oligonuclear iron complexes. The material thus introduces a promising, environmentally friendly, cost-effective, and highly efficient catalyst with combined adsorption and catalytic properties for the removal of low concentrations of VOCs from polluted air.
	Objavljeno v	Wiley-VCH; ChemCatChem; 2013; Vol. 5, issue 4; str. 986-993; Impact Factor: 5.044; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 3.585; A': 1; WoS: EI; Avtorji / Authors: Popova Margarita, Ristić Alenka, Lazar Karoly, Maučec Darja, Vassileva Mihaela, Novak Tušar Nataša
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek
5.	COBISS ID	4727578 Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO Razumevanje nadzorovanega sproščanja zdravilnih učinkovin iz mezoporoznih silikatov
		ANG Understanding controlled drug release from mesoporous silicates
	Opis	SLO V spodaj navedenem članku smo predstavili dokaze, da interakcije med zdravilno učinkovino in ogrodjem poroznega nosilca učinkovine pomembno vplivajo na kinetiko sproščanja učinkovine iz mezoporoznih materialov. To smo dokazali s skrbno načrtovanim eksperimentom in konsistentnim teoretičnim modelom. V eksperimentu smo uporabili modelno učinkovino indometacin in mezoporožna silikatna nosilca SBA-15 in MCM-41. Pokazali smo, da se iz ogrodja z manjšimi porami učinkovina sprošča počasneje, pri daljših časih pa delež sproščene učinkovine nikoli ne doseže vrednosti izmerjene pri sproščanju učinkovine iz ogrodja z večjimi porami. Noben od omenjenih pojavov ni pričakovan v sistemu, kjer interakcije molekul učinkovine z ogrodjem niso prisotne. Eksperimentalno dobljene krivulje sproščanja so se izjemno dobro ujemale s teoretičnimi napovedmi 2D Fokker-Planckove enačbe, če smo v slednji upoštevali dovolj močne privlačne interakcije učinkovine z ogrodjem. Privlačne interakcije vplivajo na relativni presek por, kjer je lokalni pretok vzdolž por različen od nič, in tako določajo učinkoviti prenos učinkovine v okoliško raztopino. Identificirali smo tudi kritične parametre, ki določajo odvisnost hitrosti sproščanja od velikosti por, in sestavili dinamični fazni diagram različnih režimov učinkovnega transporta.
		ANG Based on the results of carefully designed experiments upgraded with appropriate theoretical modeling, we present clear evidence that the release curves from mesoporous materials are significantly affected by drug-matrix interactions. In experimental curves, these interactions are manifested as a non-convergence at long times and an inverse dependence of release kinetics on pore size. Neither of these phenomena is expected in non-interacting systems. Although both phenomena have, rather sporadically, been observed in previous research, they have not been explained in terms of a general and consistent theoretical model. The concept is demonstrated on a model drug indomethacin embedded into SBA-15 and MCM-41 porous silicates. The experimental release curves agree exceptionally well with theoretical predictions in the case of significant drug-wall attractions. The latter are described using a 2D Fokker-Planck equation. One could say that the interactions affect the



		relative cross-section of pores where the local flux has a non-vanishing axial component and in turn control the effective transfer of drug into bulk solution. Finally, we identify the critical parameters determining the pore size dependence of release kinetics and construct a dynamic phase diagram of the various resulting transport regimes.
Objavljeno v		Elsevier; Journal of controlled release; 2011; Vol. 155, issue 3; str. 409-417; Impact Factor: 6.499; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 3.001; A <sup>1</sup> : 1; WoS: DY, TU; Avtorji / Authors: Ukmar Godec Tina, Maver Uroš, Planinšek Odon, Kaučič Venčeslav, Gaberšček Miran, Godec Aljaž
Tipologija	1.01	Izvirni znanstveni članek

### 7. Najpomembnejši družbeno-ekonomski rezultati programske skupine<sup>6</sup>

	Družbeno-ekonomski dosežek	
1.	COBISS ID	5184282
		Vir: COBISS.SI
	Naslov	<i>SLO</i> Vabljen predavanja na mednarodnih konferencah in tujih univerzah, za to COBISS oznako: Shranjevanje toplote v mikroporoznih materialih
		<i>ANG</i> Invited lectures at international conferences and foreign universities, for selected COBISS code: Microporous materials for heat storage applications
	Opis	<p>V vabljenem predavanju z zgornjim naslovom je N. Zabukovec Logar najprej predstavila osnovne koncepte shranjevanja toplote, s poudarkom na sorpcijskem shranjevanju toplote. V nadaljevanju so bili podani primeri študij shranjevanja toplote v aluminofosfatnih in kovinsko-organskih poroznih materialih.</p> <p>Člani programske skupine so imeli v zadnjih petih letih še 12 drugih vabljenih predavanj na mednarodnih konferencah, kot so: 6th FEZA Conference, Leipzig, September 2014 (N. Zabukovec Logar), Conference Trends in drug research, Limassol, May 2014 (G. Mali), NANOAPP 1st International Scientific Conference on Nanomaterials &amp; Applications, Portorož, September 2013 (N. Zabukovec Logar), 3rd ENMIX Workshop, Hannover, Marec 2013 (N. Zabukovec Logar), 5th Serbian-Croatian-Slovenian Symposium on Zeolites, Zlatibor, Maj 2013 (V. Kaučič, G. Mali), 35th FGMR Discussion Meeting, Muenchen, September 2013 (G. Mali), European Conference on Materials and Technologies for Sustainable Growth, Bled, September 2013 (N. Novak Tušar), SLONANO 2012, Ljubljana, Oktober 2012 (N. Zabukovec Logar), Slovenian-Italian Conference on Materials and Technologies for Sustainable Growth, Ajdovščina, Maj 2011 (N. Novak Tušar), 3rd Slovenian-Croatian symposium on Zeolites, Trogir, Hrvaška, September 2010 (N. Zabukovec Logar), 2nd Slovenian-Croatian symposium on Zeolites, Ljubljana, Oktober 2009 (V. Kaučič),</p> <p>in 23 predavanj na tujih univerzah v Evropi, Aziji, Ameriki in v Avstraliji.</p> <p>In an invited lecture with the above title N. Zabukovec Logar first introduced the basic concepts of heat storage, with an emphasis on the sorption heat storage. Then, some examples of the study of heat storage performance in some aluminophosphate and metal-organic porous materials were shown.</p> <p>Members of the program group had in the last five years 10 other invited lectures at international conferences, such as:</p>

		6th FEZA Conference, Leipzig, September 2014 (N. Zabukovec Logar), NANOAPP 1st International Scientific Conference on Nanomaterials & Applications, Portorož, September 2013 ( N. Zabukovec Logar ), 3rd ENMIX Workshop, Hannover , March 2013 (N. Zabukovec Logar), 5th Serbian-Croatian-Slovenian Symposium on Zeolites, Zlatibor, May 2013 (V. Kaučič, G. Mali), 35th FGMR Discussion Meeting, Munich, September 2013 (G. Mali), European Conference on Materials and Technologies for Sustainable Growth, Bled, September 2013 (N. Novak Tušar), SLONANO 2012 Ljubljana, October 2012 (N. Zabukovec Logar), Slovenian-Italian Conference on Materials and Technologies for Sustainable Growth, Ajdovščina, May 2011 (N. Novak Tušar), 3rd Slovenian-Croatian Symposium on Zeolites, Trogir, Croatia, September 2010 (N. Zabukovec Logar), 2nd Slovenian-Croatian Symposium on Zeolites, Ljubljana, October 2009 (V. Kaučič )	
	ANG	and 23 lectures at foreign universities in Europe, Asia, America and Australia.	
Šifra	B.04 Vabljeno predavanje		
Objavljeno v	[s. n]; 1st Euro - Asia Yeolite Conference; 2013; Str. 21; Avtorji / Authors: Zabukovec Logar Nataša		
Tipologija	1.06 Objavljeni znanstveni prispevek na konferenci (vabljeno predavanje)		
2.	COBISS ID	5141786	Vir: COBISS.SI
Naslov	SLO	Objave v poljudnih časopisih in revijah ter radijski prispevek, za to COBISS oznako: Novi hranilniki bodo omogočili trajno segrevanje toplote	
	ANG	Publications in daily newspapers, magazines and contribution on the radio, for selected COBISS code: New storage tanks will enable permanent heat storage	
Opis	SLO	V članku v poslovnem časopisu z najvišjo odmevnostjo v Sloveniji (Finance) je na poljuden način predstavljeno področje shranjevanja energije, najnovejše tehnologije in lastne raziskave na tem področju, ki so v svetovnem vrhu. Poleg omenjenega članka v Financah so člani programske skupine objavili še druge poljudne članke v časopisu Delo, Finance in reviji International Innovation (izdajatelj Research Media Ltd.), na temo shranjevanja toplote v poroznih materialih ter uporabe zeolitov v čistejših tehnologijah. Prav tako je bila N. Zabukovec Logar intervjuvanka v radijski oddaji Podobe znanja na Radiu Slovenija.	
	ANG	In an article in the business newspaper with the highest publicity in Slovenia (Finance) we presented in a simplified manner the field of energy storage, the latest technology and our own world leading research in this area. In addition to this article in Finance, members of the program group published also other popular articles in the Delo and Finance newspapers, as well as in the International Innovation journal (publisher Research Media Ltd.) on the topic of heat storage in porous materials and the use of zeolites in cleaner technologies. N. Zabukovec Logar was interviewed for Radio Slovenia in "Podobe znanja".	
Šifra	F.18 Posredovanje novih znanj neposrednim uporabnikom (seminarji, forumi, konference)		
Objavljeno v	Gospodarski vestnik; Finance; 2012; Št. 163; str. 12-13; Avtorji / Authors: Zabukovec Logar Nataša		
Tipologija	1.05 Poljudni članek		
3.	COBISS ID	4285722	Vir: COBISS.SI
Naslov	SLO	Organizacija mednarodnih konferenc, za to COBISS oznako: "2nd	

		Slovenian-Croatian symposium on zeolites"
	ANG	Organisation of international conferences, for selected COBISS code: "2nd Slovenian-Croatian symposium on zeolites"
Opis	SLO	Sodelavci v programski skupini so na Kemijskem inštitutu v Ljubljani organizirali več mednarodnih delavnic in simpozijev. Tako smo v oktobru 2009 gostili udeležence drugega slovensko-hrvaškega zeolitnega simpozija, v oktobru 2011 udeležence četrtega slovensko-hrvaškega zeolitnega simpozija in mednarodne delavnice v okviru ERA-NET projekta STOREHEAT ter v oktobru 2013 deseto mednarodno strokovno srečanje v okviru IEA joint SHC ECES Task/Annex 42/29 "Compact Thermal Energy Storage: Material Development for System Integration". Na konferencah s 35-55 udeleženci so predavali domači in tuji svetovno priznani znanstveniki in managerji na področju uporabe zeolitov v okoljskih in energijskih aplikacijah ter razvoja hranilnikov toplote iz Evrope in Amerike, na primer prof. dr. Ferdi Schüth, direktor Max-Planck inštituta iz Nemčije, prof. dr. David Serrano, direktor IMDEA Energia inštituta iz Španije, prof. dr. Nevenka Rajić z Univerze v Beogradu, prof. dr. Juergen Eckert z Univerze na Floridi, dr. Stefan Henninger iz Fraunhoferjevega inštituta za solarne sisteme iz Freiburga v Nemčiji, dr. Rainer Albert Rakoczy, vodja zeolitnega oddelka v nemški industrijski verigi Süd-Chemie AG, in drugi.
	ANG	Members of the program group organized several international workshops and symposia at the National Institute of Chemistry in Ljubljana. In October 2009 we hosted the participants of the second Slovenian-Croatian Zeolite Symposium, in October 2011, the participants of the Fourth Slovenian-Croatian Zeolite Symposium and workshop in the framework of ERA-NET project STOREHEAT, and in October 2013 the tenth International expert meeting in the framework of the joint IEA SHC ECES Task/Annex 42/29 "Compact Thermal Energy Storage: Material Development for System Integration" . At the conferences with 35-55 participants, many domestic and foreign world-renowned scientists and managers from Europe and America gave lectures on the use of zeolites in environmental and energy applications and the development of heat storage systems, for example, prof. dr. Ferdi Schüth , Director of the Max-Planck Institute in Germany , prof. dr. David Serrano , director of the IMDEA Energy Institute in Spain , prof. dr. Nevenka Rajic from the University of Belgrade , prof. dr. Juergen Eckert , University of Florida , dr. Stefan Henninger from the Fraunhofer Institute for Solar Energy Systems from Freiburg in Germany, dr. Rainer Albert Rakoczy , head of the Department of zeolite in the German industrial chain of Süd- Chemie AG, and others.
Šifra	B.01 Organizator znanstvenega srečanja	
Objavljeno v	2009; Avtorji / Authors: Novak Tušar Nataša, Kaučič Venčeslav, Zabukovec Logar Nataša, Mali Gregor, Ristić Alenka, Mazaj Matjaž, Cecowski Saša, Rangus Mojca, Ukmar Godec Tina, Maučec Darja, Kranjc Edi, Opresnik Mojca, Gorše Olga	
Tipologija	3.25 Druga izvedena dela	
4.	COBISS ID	Vir: vpis v poročilo
Naslov	SLO	Nagrade in priznanja
	ANG	Awards
Opis	SLO	Članici programske skupine dr. Tadeja Birsa Čelič in dr. Tina Ukmar Godec sta v letih 2013 in 2011 prejeli Preglovo nagrado Kemijskega inštituta za izjemno doktorsko delo s področja kemije in sorodnih ved z naslovoma doktorskih disertacij "Razvoj poroznih kovinsko-organskih adsorbentov za shranjevanje plinov in toplote" in "Proučevanje mehanizmov vgrajevanja in sproščanja modelne učinkovine iz urejenih mezoporoznih silikatov". Druge nagrade, ki so jih prejeli člani programske skupine so še Prešernovi nagradi

		Fakultete za kemijo in kemijsko tehnologijo Univerze v Ljubljani za diplomsko delo narejeno v okviru programske skupine (T. Birsa Čelič, 2009; A. Ipavec, 2009), Univerze v Ljubljani (T. Ukmar, 2009), Rektorjeva nagrada Univerze v Mariboru (T. Fakin, 2012) in Priznanje za častnega člana Društva avstrijskih kemikov V. Kaučič, 2011).
	ANG	Members of the program group dr. Tadeja Birsa Čelič in dr. Tina Ukmar Godec did receive in 2013 and 2011 Pregl award of the National Institute of Chemistry for the exceptional dissertation in chemistry and related research fields with the PhD Theses "Development of metal-organic framework adsorbents for heat and gas storage" and "A study of the mechanisms of incorporation and release of a model drug from ordered mesoporous silicates". Other awards received by the members of the program group are Prešeren's Award of the Faculty of Chemistry and Chemical Technology, University of Ljubljana for the study done within the program group (T. Birsa Čelič, 2009; A. Ipavec, 2009), University of Ljubljana (T. Ukmar, 2009), Rector's prize of the University of Maribor (T. Fakin, 2012) and Honorary membership by the Austrian Chemical Society (V. Kaučič, 2011).
Šifra	E.01 Domače nagrade	
Objavljeno v	<a href="http://www.ki.si/novice/single-prikaz/novice/novica/podeljene-preglove-nagrade-za-izjemno-doktorsko-delo-in-naziv-zasluzni-raziskovalec-kemijskega-ins/">http://www.ki.si/novice/single-prikaz/novice/novica/podeljene-preglove-nagrade-za-izjemno-doktorsko-delo-in-naziv-zasluzni-raziskovalec-kemijskega-ins/</a> in <a href="http://www.ki.si/novice/single-prikaz/novice/novica/podeljene-letosnje-preglove-nagrade-za-izjemna-doktorska-dela/">http://www.ki.si/novice/single-prikaz/novice/novica/podeljene-letosnje-preglove-nagrade-za-izjemna-doktorska-dela/</a>	
Tipologija	3.25 Druga izvedena dela	
5.	COBISS ID	Vir: vpis v poročilo
	Naslov	SLO Pedagoško delo članov programske skupine
		ANG Teaching at graduate and post-graduate education programs
	Opis	SLO Sodelavci programske skupine aktivno sodelujemo v dodiplomskem in podiplomskem raziskovalnem delu študentov in smo bili mentorji pri več diplomskih, magistrskih in doktorskih delih. Poleg tega smo bili in smo nosilci več predmetov na Fakulteti za kemijo in kemijsko tehnologijo Univerze v Ljubljani in na fakultetah Univerze v Novi Gorici. Predmeti Heterogeni katalizatorji, Kristalografija, Jedrska magnetna resonanca v trdnem, Kemija ter Kemija in kemijska tehnika omogočajo študentom spoznavanje s pomembno skupino materialov in s pomembnimi karakterizacijskimi tehnikami, ki jih lahko s pridom uporabljajo pri raziskavah trdnih snovi na raznih področjih, od nanomaterialov do biološko zanimivih materialov.
		ANG Members of the program group participate actively in undergraduate and graduate research work of students and have been mentoring several diplomas, master and PhD works. In addition, we have been and are holders of many different student courses at the Faculty of Chemistry and Chemical Technology, University of Ljubljana and at the faculties of the University of Nova Gorica. Courses Heterogeneous catalysts, Crystallography, Solid-state Nuclear Magnetic Resonance, Chemistry and Chemistry and Chemical Engineering enable students to meet with an important group of materials and relevant characterization techniques that can be advantageously used in research solids in various areas of nanomaterials to biologically interesting materials.
	Šifra	D.10 Pedagoško delo
	Objavljeno v	<a href="http://www.ung.si">http://www.ung.si</a> in <a href="http://www.fkkt.uni-lj.si/">http://www.fkkt.uni-lj.si/</a>
	Tipologija	3.25 Druga izvedena dela

## 8. Drugi pomembni rezultati programske skupine<sup>2</sup>

1. S podjetjem Silkem iz Kidričevega smo razvili in uvedli procese granulacije zeolita A, ki omogoča uporabo zeolitnih granulotov kot adsorbentov v čistilnih sistemih/filtrih. Razvoj je vključeval nabavo računalniško vodene granulacijske opreme in izdelavo delovnih postopkov za pripravo suhega granulata (uporaba veziva/visokotlačna tehnologija), določitev tehničnih karakteristik za oblikovanje in polnjenje čistilne kolone z granulatom, najem prostorov za proizvodnjo ter študijo varnosti obratovanja. Nekaj granuliranih izdelkov je že dostopnih na trgu, nekaj jih skupaj s podjetjem še razvijamo za komercialno uporabo. Primer je razvoj sinteznega postopka za pripravo granuliranega zeolita NaX kot učinkovitega adsorbenta za uporabo v hranilnikih toplote, ki je na stopnji pilotne proizvodnje (1300 litrski reaktor). Možnosti implementacije tega materiala se že kažejo v okviru sodelovanja s strokovnjaki iz Slovenije in Avstrije, ki razvijajo sisteme za sorpcijsko shranjevanje toplote na osnovi granuliranih zeolitov. Prav tako smo skupaj s podjetjem Silkem razvili sintezo in granuliranje mikroporoznega aluminofosfata APO-TRIC, prav tako za uporabo v hranilnikih toplote. Poudarek je bil na uporabi poceni reagentov, ki so na voljo v podjetju Silkem, kar bo imelo ključen vpliv na končno ceno materiala in posledično na uspešnost komercializacije sistemov za shranjevanje toplote. Sinteza poroznih aluminofosfatov je namreč lahko zelo draga.

2. Patentna prijava P-201300196, 2013-07-19; Postopek priprave zeolitnih ZSM-5 granulotov brez anorganskega veziva: Tomaž Fakin, Alenka Ristić, Venčeslav Kaučič, Nataša Zabukovec Logar, Ivan Goznik, Andrej Horvat: Urad RS za intelektualno lastnino, 2013

## 9. Pomen raziskovalnih rezultatov programske skupine<sup>8</sup>

### 9.1. Pomen za razvoj znanosti<sup>9</sup>

SLO

Raziskave v okviru programa so prispevale k razvoju znanosti z novimi odkritji na področju materialov za uporabo v energetiki in ekologiji, ki so bila tudi primerno predstavljena mednarodni in domači javnosti. Nove materiale smo uspešno promovirali preko vabljenih predavanj, vabljenih objav v uglednih strokovnih in znanstvenih revijah, aktivnih članstvih v znanstvenih in drugih združenjih (FEZA, IEA) ter tudi s prenosom pridobljenega znanja na mlajše raziskovalce in študente. Najbolj izstopajo dosežki na področju sinteze in karakterizacije novih materialov za shranjevanje toplote ter za čiščenje odpadnih voda in zraka. Področje shranjevanja toplote je eno od primarnih raziskovalnih usmeritev v slovenskem in evropskem prostoru, saj je odločilno za širšo uporabo sončne toplotne energije in odpadne toplote za ogrevanje/hlajenje prostorov in pripravo tople vode, za kar v razvitih državah porabimo polovico vse energije. Tako smo za učinkovitejše sisteme shranjevanje toplote v obdobju trajanja programa razvili nekaj zelo obetajočih materialov, ki smo jih tudi natančno okarakterizirali za boljše razumevanje odnosa struktura-lastnosti materiala ter posledično boljšo optimizacijo za končno uporabo. S stališča ohranjanja čistega okolja so bile raziskave materialov za čiščenje vode in zraka, prav tako zelo pomembne saj lahko ključno prispevajo k trajnostnem razvoju. Tudi na tem področju smo se osredotočili na natančno strukturno karakterizacijo najbolj učinkovitih materialov za boljše razumevanje adsorpcijskih procesov in predvsem katalitskih procesov pri razgradnji toksičnih organskih onesnažil.

ANG

Research in the scope of the program contributed to the development of science with some new discoveries in the field of materials for energy and environmental applications, which were also successfully presented at international and national level. New materials were successfully promoted through keynote lectures, invited publications in renowned scientific journals, active memberships in scientific and other associations (FEZA, IEA), as well as through the transfer of knowledge to younger researchers and students. The most important achievements were made in the field of synthesis and characterization of new materials for heat storage and water and air cleaning. Heat storage is one of the primary research focuses in Slovenian and European area, because it is crucial for the wider use of solar thermal energy and waste heat for heating/cooling and domestic hot water, which in developed countries represents half of the final energy demand. Thus, for efficient heat storage systems some very promising materials were developed, which were also structurally characterised in detail for a better understanding of the structure-property relationship and, consequently, better optimization for final use. From

the standpoint of maintaining a clean environment, new materials for water and air cleaning developed in the scope of the program are also very important as they can significantly contribute to a sustainable development world-wide. Also in this field we have focused on precise structural characterization of the most effective materials for better understanding of the processes of adsorption and catalytic processes mainly from the degradation of toxic organic pollutants.

## 9.2. Pomen za razvoj Slovenije<sup>10</sup>

SLO

V okviru programa smo izvajali aplikativne raziskave s slovenskimi industrijskimi partnerji. Na ta način smo omogočili prenos sinteze najbolj zanimivih materialov iz laboratorijskega na polindustrijski nivo ter v enem primeru tudi široko uporabo/prodajo na Slovenskem trgu. Sodelovali smo pri pripravi novega zeolitnega adsorbenta na polindustrijskem nivoju (iz 250 ml na 1300L reaktor), uspešnem granuliranju več različnih materialov na pilotni granulacijski liniji ter uspešnem razvoju inovacije (priprava filtra za čiščenje lahkih spojin v notranjih prostorih). Pomemben prispevek programa je tudi uspešnost izobraževanja mladih. Mladi strokovnjaki, ki so v doktorirali v okviru programske skupine Nanoporozni materiali že zasedajo pomembna mesta v javnem sektorju in gospodarstvu, tako doma kot v tujini, kar je dokaz za uspešno izobraževalno delo uveljavljenih članov programske skupine v preteklem obdobju. Prav tako smo z različnimi aktivnostmi, kot so objave v poljudnih medijih in organizacija mednarodnih znanstvenih in strokovnih srečanj na Kemijskem inštitutu oziroma drugje v Sloveniji, prispevali k boljšemu poznavanju obravnavane problematike v slovenskem prostoru.

ANG

In the scope of the project, a common applied research with Slovenian industrial partners was successfully carried out. In this way, we enabled the transfer of the synthesis of the most interesting materials from the laboratory to semi-industrial level, and in one case also commercialisation in the Slovenian market. We participated in the preparation of new zeolite adsorbents at pilot level (from 250 ml to 1300L reactor), a successful granulation of several different materials on a pilot granulation line and in the successful development of innovation (preparation of the filter for cleaning of volatile compounds in indoor air). An important contribution to the success of the program was education of young people. Young professionals who finished their doctoral studies within the program group Nanoporous materials already occupy important positions in the public and private sectors, both at home and abroad, which is a proof for the successful work of established program group members in the previous period. With different other activities, such as publications in the popular media and the organization of international scientific and professional meetings at the National Institute of Chemistry and elsewhere in Slovenia, we contributed to a better understanding of the issues addressed in the program in the country.

## 10. Zaključena mentorstva članov programske skupine pri vzgoji kadrov v obdobju 1.1.2009-31.12.2014<sup>11</sup>

### 10.1. Diplome<sup>12</sup>

vrsta usposabljanja	število diplom
bolonjski program - I. stopnja	10
bolonjski program - II. stopnja	4
univerzitetni (stari) program	1

### 10.2. Magisterij znanosti in doktorat znanosti<sup>13</sup>

Šifra raziskovalca	Ime in priimek	Mag.	Dr.	MR	
25024	Saša Cecowski	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	
32105	Tadeja Birsa Čelič	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	

33740	Andrej Ipavec	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	
29027	Mojca Rangus	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	
30851	Tina Ukmar Godec	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	
33203	Tomaž Čendak	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	

Legenda:

**Mag.** - Znanstveni magisterij

**Dr.** - Doktorat znanosti

**MR** - mladi raziskovalec

### 11. Pretok mladih raziskovalcev – zaposlitev po zaključenem usposabljanju<sup>14</sup>

Šifra raziskovalca	Ime in priimek	Mag.	Dr.	Zaposlitev	
25024	Saša Cecowski	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	B - Družbene dejavnosti	
32105	Tadeja Birsa Čelič	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	C - Gospodarstvo	
33740	Andrej Ipavec	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	C - Gospodarstvo	
29027	Mojca Rangus	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	A - raziskovalni zavodi	
30851	Tina Ukmar Godec	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	E - Tujina	
33203	Tomaž Čendak	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	A - raziskovalni zavodi	

Legenda zaposlitev:

**A** - visokošolski in javni raziskovalni zavodi

**B** - gospodarstvo

**C** - javna uprava

**D** - družbene dejavnosti

**E** - tujina

**F** - drugo

### 12. Vključenost raziskovalcev iz podjetij in gostovanje raziskovalcev, podoktorandov ter študentov iz tujine, daljše od enega meseca, v obdobju 1.1.2009-31.12.2014

Šifra raziskovalca	Ime in priimek	Sodelovanje v programski skupini	Število mesecev	
0	Manuel Ojeda Rodríguez	C - študent – doktorand	3	
0	Manuel Ojeda Rodríguez	D - podoktorand	3	
0	Marial Linares Serrano	D - podoktorand	6	
0	Zafer Ozturk	C - študent – doktorand	1	
0	Mia Vlahović	C - študent – doktorand	1	
0	Karmen Margeta	D - podoktorand	1	

Legenda sodelovanja v programski skupini:

**A** - raziskovalec/strokovnjak iz podjetja

**B** - uveljavljeni raziskovalec iz tujine

**C** - študent – doktorand iz tujine

**D** - podoktorand iz tujine

**13. Vključevanje v raziskovalne programe Evropske unije in v druge mednarodne raziskovalne in razvojne programe ter drugo mednarodno sodelovanje v obdobju 1.1.2009-31.12.2014<sup>15</sup>**

SLO

Programska skupina ali posamezni člani skupine so v letih 2009-2014 sodelovali v naslednjih raziskovalnih programih Evropske unije:

MATERA ERA-NET projekt STOREHEAT (2011-2014): Novi materiali za sorpcijsko shranjevanje toplote

Nosilka: prof. dr. Nataša Zabukovec Logar

FP7 projekt EUROLIS (2012-2015): Napredne Evropske litij žveplave celice za avtomobilске aplikacije

Nosilec: dr. Robert Dominko, sodelavka iz programske skupine Nanoporozni materiali: prof. dr. Nataša Novak Tušar

MNT ERA-NET projekt SVEN-SLO-BATT (2007-2009): Švedsko-Slovenska Nano-baterijska mreža

Nosilec: dr. Robert Dominko, sodelavec iz programske skupine Nanoporozni materiali: prof. dr. Gregor Mali

FP6 projekt INSIDE-PORES (2004-2009): Center odličnosti

Nosilec: prof. dr. N. Kanellopoulos, vodilna sodelavca iz programske skupine Nanoporozni materiali: prof. dr. Venčeslav Kaučič in prof. dr. Nataša Novak Tušar

Programska skupina ali posamezni člani skupine so v letih 2009-2014 sodelovali še v naslednjih mednarodnih projektih izven financiranja ARRS:

EUREKA projekt PUREWATER E!4208 (2008-2011): Naravni zeoliti v kontroli kvalitete vode

Nosilec: prof. dr. Venčeslav Kaučič

Projekt COST D36 (2006-2011) Odnos struktura-lastnosti na površini funkcionaliziranih materialov

Predstavniki Slovenije: prof. dr. Venčeslav Kaučič

Projekt COST CM0903 (2010-2013) Uporaba biomase za pridobivanje trajnostnih goriv in kemikalij

Predstavniki Slovenije: prof. dr. Nataša Novak Tušar

Projekt COST TD1203 (2012-2016) Vrednotenje odpadkov hrane za pridobivanje trajnostnih kemikalij, materialov in goriv

Predstavniki Slovenije: prof. dr. Nataša Novak Tušar

EU COST akcija FP1306 (2014-2018) Vrednotenje odpadkov lesne biomase za trajnostno proizvodnjo kemikalij in goriv

Predstavniki Slovenije: prof. dr. Nataša Novak Tušar

Eksperimentalni projekt LANSCE (Los Alamos Neutron Science Centre), New Mexico, USA, 2014-2016

Nosilec prof. dr. Nataša Novak Tušar

Eksperimentalni projekti ELETTRA (XAFS beamline), Italija, 2014-2016

Nosilki prof. dr. Nataša Novak Tušar, dr. Mojca Rangus

**14. Vključenost v projekte za uporabnike, ki so v obdobju trajanja raziskovalnega programa (1.1.2009-31.12.2014) potekali izven financiranja ARRS<sup>16</sup>**

SLO

Industrijska pogodba med KRKO in KI (II/20-106 259/2007 in aneksi za leta 2008-2014)

Industrijska pogodba med SALONIT Anhovo in KI (231/11-L04/L09)

Industrijska pogodba med SILKEM Kidričevo in KI (1/2003)

Programska skupina je vključena v:

CO EN-FIST (2009 - 2013) (prof. dr. Gregor Mali je bil vodja projektne skupine »Študije polimorfizma z NMR v trdnem«)

CONOT (2009-2013) (prof. dr. Nataša Zabukovec Logar je bila vodja projektne



skupine »Materiali za shranjevanje vodika«)  
v slovensko tehnološko platformo za napredne materiale NaMaT, ki je članica evropske EuMaT (prof. 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  
v mednarodni infrastrukturalni center/mreža C-ERIC. <http://www.c-eric.eu/index.php?n=Main.HomePage>; Slovenski koordinator Janez Plavec, sodelavec iz programske skupine Nanoporozni materiali; prof. dr. Gregor Mali  
IEA združenje, natančneje v *IEA SHC ECES joint Task/Annex 42/24 and 42/29* »Compact thermal energy storage material development for system integration«, vodilna sodelavka iz programske skupine dr. Alenka Ristić

Prof. dr. Nataša Zabukovec Logar je:  
od leta 2013 predsednica Slovenskega zeolitnega društva  
članica glavnega odbora Slovenskega kemijskega društva  
od leta 2015 zakladnica Zveze evropskih zeolitnih društev

Prof. dr. Venčeslav Kaučič je:  
predsednik znanstvenega sveta Slovenske znanstvene fundacije (tretji mandat)  
od leta 1996 predsednik Slovenskega kemijskega društva  
bil od 1997 do 2013 vodja razvoja v SILKEM d.o.o.  
bil od 2011 do 2013 predsednik Slovenskega zeolitnega društva  
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)  
je podpredsednik evropskega inštituta ENMIX (od 2013)

#### **15. Ocena tehnološke zrelosti rezultatov raziskovalnega programa in možnosti za njihovo implementacijo v praksi (točka ni namenjena raziskovalnim programom s področij humanističnih ved)<sup>17</sup>**

SLO

S podjetjem Silkem iz Kidričevega smo razvili in uvedli procese granulacije zeolita A, ki omogoča uporabo zeolitnih granulotov kot adsorbentov v čistilnih sistemih/filtrih. Razvoj je vključeval nabavo računalniško vodene granulacijske opreme in izdelavo delovnih postopkov za pripravo suhega granulata (uporaba veziva/visokotlačna tehnologija), določitev tehničnih karakteristik za oblikovanje in polnjenje čistilne kolone z granulatom, najem prostorov za proizvodnjo ter študijo varnosti obratovanja. Nekaj granuliranih izdelkov je že dostopnih na trgu, nekaj jih skupaj s podjetjem še razvijamo za komercialno uporabo. Primer je razvoj sinteznega postopka za pripravo granuliranega zeolita NaX kot učinkovitega adsorbenta za uporabo v hranilnikih toplote, ki je na stopnji pilotne proizvodnje (1300 litrski reaktor). Možnosti implementacije tega materiala se že kažejo v okviru sodelovanja s strokovnjaki iz Slovenije in Avstrije, ki razvijajo sisteme za sorpcijsko shranjevanje toplote na osnovi granuliranih zeolitov. Prav tako smo skupaj s podjetjem Silkem razvili sintezo in granuliranje mikroporoznega aluminofosfata APO-TRIC, prav tako za uporabo v hranilnikih toplote. Poudarek je bil na uporabi poceni reagentov, ki so na voljo v podjetju Silkem, kar bo imelo ključen vpliv na končno ceno materiala in posledično na uspešnost komercializacije sistemov za shranjevanje toplote. Sinteza poroznih aluminofosfatov je namreč lahko zelo draga.

Primeren material za implementacijo je tudi visoko učinkovit adsorbent in katalizator (z železom funkcionaliziran silikat s poroznostjo med delci - FeKIL-2) za razgradnjo lahkih organskih snovi v zraku. Sintezni postopek je v fazi prenosa na polindustrijski nivo (1300 litrski reaktor) v sodelovanju s podjetjem Silkem. Možna implementacija so adsorpcijsko-katalitski sistemi v industriji za odstranjevanje lahkih organskih onesnažil iz odpadnih in dimnih plinov s katalitsko oksidacijo.

**16. Ocenite, ali bi doseženi rezultati v okviru programa lahko vodili do ustanovitve spin-off podjetja, kolikšen finančni vložek bi zahteval ta korak ter kakšno infrastrukturo in opremo bi potrebovali**

možnost ustanovitve spin-off podjetja	<input checked="" type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
potrebni finančni vložek	3.000.000 EUR
ocena potrebne infrastrukture in opreme <sup>18</sup>	Proizvodnjo materialov za shranjevanje toplote in katalitsko oksidacijo smo začeli implementirati s podjetjem Silkem, s katerim imamo ustanovljeno dolgoletno sodelovanje. Start-up podjetje bi omogočilo umestitev materialov v sisteme za shranjevanje toplote (določitev prenosa mase in toplote) in čistilce zraka (dimenzioniranje naprav) s potrebno strojno in programsko opremo.

**17. Izjemni dosežek v letu 2014<sup>19</sup>**

**17.1. Izjemni znanstveni dosežek**

V reviji ChemCatCem (IF 5.1) smo objavili članek, ki opisuje nov potencialni katalizator za katalitsko oksidacijo industrijskega zraka onesnaženega z lahko hlapnimi organskimi spojinami.

Nanodelci bakrovega oksida (CuO) nanešeni na različne nosilce so pomemben katalizator v mnogih industrijskih procesih. Mezoporozni silikati so zanimivi kot okolju prijazni nosilci. Kot zelo uporaben se je izkazal v našem laboratoriju sintetiziran mezoporozni silikatni nosilec s poroznostjo med delci (KIL-2, ime je izpeljano iz imena Kemijski Inštitut Ljubljana). V prispevku smo pokazali izboljšane redukcijske lastnosti bakrovega oksida (CuO) v interakciji z silicijevim nosilcem KIL-2, ki vsebuje železo (FeKIL-2). Katalizator CuFeKIL-2 z različno vsebnostjo Fe in konstantno vsebnostjo Cu (6 ut. %) smo testirali v reakciji oksidacije toluena. Ugotovili smo, da je hitrost avtoredukcije CuO odvisna od vsebnosti železa in razložili zakaj je pri določenem molskem razmerju Cu/Fe izrazito narasla.

**17.2. 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 in obdelavo teh podatkov za evidence ARRS;
- so vsi podatki v obrazcu v elektronski obliki identični podatkom v obrazcu v papirnati obliki;
- so z vsebino poročila seznanjeni in se strinjajo vsi izvajalci raziskovalnega programa.

**Podpisi:**

*zastopnik oz. pooblaščen oseba  
matične RO (JRO in/ali RO s  
koncesijo):*

Kemijski inštitut

in

*vodja raziskovalnega programa:*

Nataša Zabukovec Logar

**ŽIG**

Kraj in datum:

Ljubljana

16.3.2015

## Oznaka poročila: ARRS-RPROG-ZP-2015/169

<sup>1</sup> Napišite povzetek raziskovalnega programa v slovenskem jeziku (največ 3.000 znakov vključno s presledki – približno pol strani, velikost pisave 11) in angleškem jeziku (največ 3.000 znakov vključno s presledki – približno pol strani, velikost pisave 11). [Nazaj](#)

<sup>2</sup> Napišite kratko vsebinsko poročilo, v katerem predstavite raziskovalno hipotezo in opis raziskovanja. Navedite ključne ugotovitve, znanstvena spoznanja, rezultate in učinke raziskovalnega programa in njihovo uporabo ter sodelovanje s tujimi partnerji. V primeru odobrenega povečanja obsega financiranja raziskovalnega programa v letu 2014 mora poročilo o realizaciji programa dela zajemati predložen program dela ob prijavi in predložen dopolnjen program dela v letu 2014. Največ 12.000 znakov vključno s presledki (približno dve strani, velikosti pisave 11). [Nazaj](#)

<sup>3</sup> Realizacija raziskovalne hipoteze. Največ 3.000 znakov vključno s presledki (približno pol strani, velikosti pisave 11). [Nazaj](#)

<sup>4</sup> V primeru bistvenih odstopanj in sprememb od predvidenega programa dela raziskovalnega programa, kot je bil zapisan v predlogu raziskovalnega programa oziroma v primeru sprememb, povečanja ali zmanjšanja sestave programske skupine v zadnjem letu izvajanja raziskovalnega programa, napišite obrazložitev. V primeru, da sprememb ni bilo, navedite: "Ni bilo sprememb.". Največ 6.000 znakov vključno s presledki (približno ena stran, velikosti pisave 11). [Nazaj](#)

<sup>5</sup> Navedite znanstvene dosežke (največ pet), ki so nastali v okviru izvajanja raziskovalnega programa. Raziskovalni dosežek iz obdobja izvajanja programa 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](#)

<sup>6</sup> Navedite družbeno-ekonomske dosežke (največ pet), ki so nastali v okviru izvajanja raziskovalnega programa. Družbeno-ekonomski dosežek iz obdobja izvajanja programa 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 programa ... - v obeh primerih ni COBISS ID). [Nazaj](#)

<sup>7</sup> Navedite rezultate raziskovalnega programa iz obdobja izvajanja programa v primeru, da katerega od rezultatov ni mogoče navesti v točkah 6 in 7 (npr. ker se ga v sistemu COBISS ne vodi). Največ 2.000 znakov vključno s presledki (približno 1/3 strani, velikost pisave 11). [Nazaj](#)

<sup>8</sup> Pomen raziskovalnih rezultatov za razvoj znanosti in za razvoj Slovenije bo objavljen na spletni strani: <http://www.sicris.si/> za posamezen program, ki je predmet poročanja. [Nazaj](#)

<sup>9</sup> Največ 4.000 znakov vključno s presledki (približno 2/3 strani, velikost pisave 11). [Nazaj](#)

<sup>10</sup> Največ 4.000 znakov vključno s presledki (približno 2/3 strani, velikost pisave 11). [Nazaj](#)

<sup>11</sup> Upoštevajo se le tiste diplome, magisteriji znanosti in doktorati znanosti (zaključene/i v obdobju 1.1.2009–31.12.2014), pri katerih so kot mentorji sodelovali člani programske skupine. [Nazaj](#)

<sup>12</sup> Vpišite število opravljenih diplom v času izvajanja raziskovalnega programa glede na vrsto usposabljanja. [Nazaj](#)

<sup>13</sup> Vpišite šifro raziskovalca in/ali ime in priimek osebe, ki je v času izvajanja raziskovalnega programa pridobila naziv magister znanosti in/ali doktor znanosti ter označite doseženo izobrazbo. V primeru, da se je oseba usposabljala po programu Mladi raziskovalci, označite "MR". [Nazaj](#)

<sup>14</sup> Za mlade raziskovalce, ki ste jih navedli v tabeli 11.2. točke (usposabljanje so uspešno zaključili v obdobju od 1.1.2009 do 31.12.2014), izberite oz. označite, kje so se zaposlili po zaključenem usposabljanju. [Nazaj](#)

<sup>15</sup> Navedite naslove projektov in ime člana programske skupine, ki je bil vodja/koordinator navedenega projekta. Največ 6.000 znakov vključno s presledki (približno ena stran, velikosti pisave 11). [Nazaj](#)

<sup>16</sup> Navedite naslove projektov, ki ne sodijo v okvir financiranja ARRS (npr: industrijski projekti, projekti za druge naročnike, državno upravo, občine idr.) in ime člana programske skupine, ki je bil vodja/koordinator navedenega projekta. Največ 6.000 znakov vključno s presledki (približno ena stran, velikosti pisave 11). [Nazaj](#)

<sup>17</sup> Opišite možnosti za uporabo rezultatov v praksi. Opišite izdelke oziroma tehnologijo in potencialne trge oziroma tržne niše, v katere sodijo. Ocenite dodano vrednost izdelkov, katerih osnova je znanje, razvito v okviru programa oziroma dodano vrednost na zaposlenega, če jo je mogoče oceniti (npr. v primerih, ko je rezultat izboljšava obstoječih tehnologij oziroma izdelkov). Največ 3.000 znakov vključno s presledki (približno pol strani, velikosti pisave 11). [Nazaj](#)

<sup>18</sup> Največ 1.000 znakov vključno s presledki (približno 1/6 strani, velikost pisave 11) [Nazaj](#)

<sup>19</sup> Navedite en izjemni znanstveni dosežek in/ali en izjemni družbeno-ekonomski dosežek raziskovalnega programa v letu 2014 (največ 1000 znakov, vključno s presledki, velikost pisave 11). 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 priložitev/-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-RPROG-ZP/2015 v1.00b

A6-56-92-07-40-DC-74-54-77-6D-8B-31-84-86-38-32-D6-27-FB-91

## **Priloga 1**

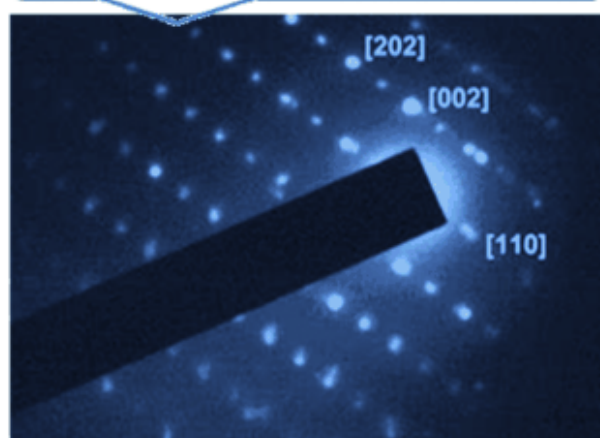
## KEMIJA

### Področje: 1.04.03 Anorganska kemija

Dosežek 1: Margarita Popova, Alenka Ristić, Matjaž Mazaj, Darja Maučec, Momtchil Dimitrov, Nataša Novak Tušar. Autoreduction of copper on silica and iron-functionalized silica nanoparticles with interparticle mesoporosity. *ChemCatChem*, 6 (2014) 271-277. Vir: COBISS.SI-ID [5379866](#)



Autoreduction at inert atmosphere on FeKIL-2



Nanodelci bakrovega oksida (CuO) nanešeni na različne nosilce so pomemben katalizator v mnogih industrijskih procesih. Mezoporozni silikati so zanimivi kot okolju prijazni nosilci. Kot zelo uporaben se je izkazal v našem laboratoriju sintetiziran mezoporozni silikatni nosilec s poroznostjo med delci (KIL-2, ime je izpeljano iz imena Kemijski Inštitut Ljubljana). V prispevku smo pokazali izboljšane redukcijske lastnosti bakrovega oksida (CuO) v interakciji z silicijevim nosilcem KIL-2, ki vsebuje železo (FeKIL-2). Katalizator CuFeKIL-2 z različno vsebnostjo Fe in konstantno vsebnostjo Cu (6 ut. %) smo testirali v reakciji oksidacije toluena. Ugotovili smo, da je hitrost avtoredukcije CuO odvisna od vsebnosti železa in razložili zakaj je pri določenem molskem razmerju Cu/Fe izrazito narasla.

CuO nanodelci na silikatnem nosilcu, ki vsebuje železo, so zaradi izredno povečane učinkovitosti pri oksidaciji toluena, nov potencialni katalizator pri katalitski oksidaciji industrijskega zraka onesnaženega z lahko hlapnimi organskimi spojinami.