

ZNANSTVENO-STRUČNA DJELATNOST
SCIENTIFIC AND PROFESSIONAL ACTIVITIES

2007 - 2008



Sveučilište u Zagrebu // Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije
University of Zagreb // Faculty of Chemical Engineering and Technology

ZNANSTVENO - STRUČNA DJELATNOST FKIT-a 2007. - 2008.

SCIENTIFIC AND PROFESSIONAL ACTIVITIES 2007 - 2008

IMPRESUM

Nakladnik Published by	Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije University of Zagreb, Faculty of Chemical Engineering and Technology
Za nakladnika For publisher	Antun Glasnović
Urednici Editors	Marko Rogošić Sandra Babić Vesna Tomašić Gordana Matijašić
Lektura hrvatskog jezika Croatian language editor	Marko Rogošić
Lektura engleskog jezika English language editor	Marko Rogošić
Grafičko oblikovanje i prijelom Design and layout	Gordana Matijašić
Naslovnica Cover design	Gordana Matijašić
Tisak Printed by	Sveučilišna tiskara d.o.o.
Naklada Edition	500

ZAGREB, 2008.

ISBN 978-953-6470-41-9

CIP zapis dostupan u računalnom
katalogu Nacionalne i sveučilišne
knjižnice u Zagrebu pod brojem
681441.

ZNANSTVENO - STRUČNA DJELATNOST FKIT-a 2007. - 2008.
SCIENTIFIC AND PROFESSIONAL ACTIVITIES 2007 - 2008

PREDGOVOR

U listopadu 2007. Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije (FKIT) Sveučilišta u Zagrebu objavio je dvije brošure kojima se nastojao predstaviti svima potencijalno zainteresiranima za suradnju. Prva od brošura, Katalog opreme, opisuje materijalnu osnovu za znanstveno istraživački rad na FKIT-u, a druga, Izvješće o znanstvenoj djelatnosti 2002. - 2006., prikazuje, na neki način, intelektualne potencijale Fakulteta. U ovoj će se brošuri, kao dodatak dvjema lani objavljenima, predstaviti tekuća znanstvena i stručna djelatnost Fakulteta. Bit će to nastavak rada na promociji Fakulteta, u potrazi za novim izazovima s ciljem kontinuiranog jačanja vlastitih sposobnosti; bit će to osvrt na trenutak koji nudi pogled u budućnost.

Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije prepoznat je po svojoj predanosti znanstveno-istraživačkom i stručnom radu. Primjerice, Ministarstvo znanosti obrazovanja i športa (MZOS) Republike Hrvatske odobrilo je financiranje šest znanstvenih programa i ukupno 34 znanstvena projekta državnim novcem. Projekti se izvode uglavnom u području tehničkih znanosti, polje kemijsko inženjerstvo (23) i području prirodnih znanosti, polje kemija (8), odnosno fizika (1), što je sukladno osnovnim djelatnostima na FKIT-u. Svoju širinu Fakultet dokazuje i projektima iz područja biotehničkih znanosti, polje biotehnologija (1) te područja humanističkih znanosti, polje filologija (1).

Dio projekata pripada temeljnim istraživanjima potaknutima stjecanjem novih znanja i jačanjem opće uloge znanosti u društvu. Drugi se projekti deklariraju kao primijenjena istraživanja usmjerena na razvoj novih proizvoda i tehnologija u skladu s temeljnim djelatnostima Fakulteta. Prioritetne teme istraživanja su: zaštita okoliša i gospodarenje okolišem; razvoj novih naprednih materijala i održivih tehnologija; energija, alternativni i obnovljivi izvori energije; razvoj novih lijekova; industrijske biotransformacije i ostale srodne teme.

Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije uključen je i u realizaciju međunarodnih znanstvenih projekata, premda ne u onoj mjeri u kojoj bismo to stvarno željeli. Velik dio aktivnosti FKIT-a odvija se i u okviru stručnih projekata. Brojnost i vrsta projekata koji se u ovom trenutku odvijaju na FKIT-u prikazani su u Tablici 1.

Tablica 1. Aktivni znanstveni i stručni projekti na FKIT-u

Broj aktivnih znanstvenih projekata		Broj stručnih projekata započetih u posljednje 3 godine, koji su trajali		
(MZOS)	Međunarodni	do 3 mjeseca	do 1 godine	više od 1 godine
34	8	11	11	5

Odrednice suvremenog znanstveno-istraživačkog rada su, između ostalog, multidisciplinarnost i poticanje suradnje, kako unutar institucije, tako i s drugima. Znanstveni projekti na FKIT-u mahom su udruženi u znanstvene programe. 29 od ukupno 34 projekta financirana od MZOŠ je u nekom od programa na Fakultetu kemijskog inženjerstva ili u programima nekog drugog fakulteta (Građevinski fakultet, Rudarsko-geološko-naftni fakultet) ili instituta (Institut "Ruđer Bošković", Institut za hrvatski jezik i jezikoslovlje). K tome, u programima na FKIT-u sudjeluju i projekti s drugih fakulteta i instituta (Kemijsko-tehnološki fakultet iz Splita, Prehrambeno biotehnološki fakultet, Tekstilno-tehnološki fakultet, Brodarski institut d.o.o., Fakultet strojarstva i brodogradnje). Samo pet projekata FKIT-a odvija se samostalno.

O kvaliteti znanstvenog rada svjedoče brojni znanstveni radovi objavljeni u međunarodno priznatim časopisima. Od aktiviranja projekata početkom 2007. do svibnja 2008., dakle u nepunu godinu i pol objavljeno je ukupno 129 znanstvenih radova u časopisima citiranim u Current Contentsu i obranjeno je 11 disertacija.

Vrijednost FKIT-a očituje se i u nagradama što ih pojedinci, nastavnici Fakulteta redovito primaju, između ostalog:

- Nagrade Akademije tehničkih znanosti Hrvatske za životno djelo u 2007. (Stanka Zrnčević)
- Nagrade Grada Zagreba za 2008. (Marija Kaštelan-Macan)
- Nagrade "Fran Bošnjaković" Sveučilišta u Zagrebu za posebna postignuća iz područja tehničkih znanosti za 2007. (Antun Glasnović)

I mladi znanstvenici našeg Fakulteta redovito bivaju nagrađeni, primjerice:

- Godišnjom nagradom Društva sveučilišnih nastavnika i drugih znanstvenika u Zagrebu mladim znanstvenicima i umjetnicima za znanstvena i umjetnička dostignuća za 2007. (Marijana Hranjec)
- Nagradom "Vera Johanides" za 2007., Akademije tehničkih znanosti Hrvatske, koja se podjeljuje mladom znanstveniku u području biotehničkih znanosti. (Bruno Zelić)
- Stipendijom "Za žene u znanosti" za 2008., koju dodjeljuje Hrvatsko povjerenstvo za UNESCO pri Ministarstvu kulture u suradnji s L'ORÉAL -om (Karolina Maduna Valkaj)

Marko Rogošić

FOREWORD

In October 2007, the Faculty of Chemical Engineering and Technology of the University of Zagreb (FKIT) published two brochures in an effort to present itself to potential collaborators. The first one, entitled Equipment Catalogue described the material basis for science and research at FKIT. The other one, entitled Scientific Activities Report 2002-2006 presented, in a way, the intellectual potential of the Faculty. This brochure will, as a complement to those published last year, present the current scientific and professional activities of the Faculty. It will be the continuation of promotion of FKIT, searching for new challenges with an aim of continuously improving our excellence; in other words, a moment's notice offering an insight into the future.

The Faculty of Chemical Engineering and Technology is recognized by authorities in Croatia for its dedication toward science, research and professional work. The Ministry of Science, Education and Sports of the Republic of Croatia approved the financial support for six scientific programs and a total of 34 scientific projects. The projects are performed mostly in Technical Sciences, Chemical Engineering field (23), or Natural Sciences, fields of Chemistry (8) and Physics (1). The wide range of interest is proven by the projects in Biotechnical Sciences, Biotechnology field (1) and Humanities, Philology field (1).

A number of projects can be characterized as fundamental research motivated by rising the knowledge level and strengthening the general role of science in the society. Many others are being declared as applied research oriented toward the development of new products and technologies in accordance with the main activities of the Faculty. The priority topics of research are: environmental protection and management, development of advanced materials and sustainable technologies, alternative and renewable energy sources, development of new pharmaceuticals, industrial biotransformations and other related subjects.

The Faculty of Chemical Engineering and Technology is involved in international scientific projects as well, but we may not be satisfied by the current extent of international collaboration. In addition, professional projects occupy a large part of the activities of FKIT. The number and type of active projects on FKIT are shown in Table 1.

Table 1. Active scientific and professional projects at FKIT.

Number of active scientific projects		Number of professional projects activated in the last three years. The duration is indicated below.		
Funded by the Ministry of Science, Education and Sports	International	< 3 months	3 months – 1 year	> 1 year
34	8	11	11	5

The determinants of modern scientific and research activities are, among others, multidisciplinary approach and promotion of collaboration, within the institution as well as with the others. Scientific projects on FKIT are mostly affiliated with the scientific programs. 29 out of 34 projects funded by the Ministry of Science, Education and Sports of the Republic of Croatia are involved in the programs, lead either by the Faculty of Chemical Engineering and Technology or by some other faculty of the University of Zagreb (Faculty of Civil Engineering, Faculty of Mining, Geology and Petroleum Engineering) or institute (The Ruđer Bošković Institute Zagreb, Institute for Croatian Language and Linguistics). In addition, the programs steered by FKIT include projects from other faculties or institutes (Brodarski Institute Zagreb, Faculty of Chemistry and Technology of the University of Split, faculties of the University of Zagreb: Faculty of Food Technology and Biotechnology, Faculty of Textile Technology, Faculty of Mechanical Engineering and Naval Architecture). Only five of the projects by FKIT are self-contained.

The quality of scientific work is testified by the number of papers published in international scientific journals. Since the start of the projects in the beginning of 2007, and concluding with May 2008, 129 papers indexed by Current Contents were published and 11 Ph.D. theses were defended at the Faculty.

The scientists from the Faculty of Chemical Engineering and Technology have received numerous awards. In the last two years we mention:

- The Croatian Academy of Technical Sciences Award for Lifetime Achievement in 2007. (Stanka Zrnčević)
- The City of Zagreb Award in 2008. (Marija Kaštelan-Macan)
- The "Fran Bošnjaković" Award, by the University of Zagreb, for special achievements in the area of technical sciences in 2007. (Antun Glasnović)

Many junior scientists were awarded as well. Here we mention:

- The Annual Award of the Society of University Teachers and other Scientists in Zagreb, presented to junior scientists and artists for scientific or art achievements in 2007. (Marijana Hranjec)
- The Vera Johanides Award in 2007, by the Croatian Academy of Technical Sciences, presented to a junior scientist in the field of biotechnical sciences. (Bruno Zelić)
- UNESCO/L'ORÉAL Co-Sponsored Fellowships for Young Women in Life Sciences in 2008, presented by the Croatian Committee for UNESCO affiliated with the Ministry of Culture of the Republic of Croatia. (Karolina Maduna Valkaj)

Marko Rogošić

SADRŽAJ

ZNANSTVENI PROGRAMI I PROJEKTI NA FKIT-U	1
MEĐUNARODNI ZNANSTVENI PROJEKTI	48
OSTALE MEĐUNARODNE AKTIVNOSTI	49
ČASOPISI, RADOVI, CITIRANOST	51
STRUČNI PROJEKTI	55

CONTENTS

SCIENTIFIC PROGRAMS AND PROJECTS AT THE FACULTY	59
INTERNATIONAL SCIENTIFIC PROJECTS	106
OTHER INTERNATIONAL ACTIVITIES	107
JOURNALS, ARTICLES, CITATIONS	109
PROFESSIONAL PROJECTS	113



ZNANSTVENI PROGRAMI I PROJEKTI NA FKIT-U

Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije Sveučilišta u Zagrebu nositelj je 6 znanstvenih programa s ukupno 30 projekata, od kojih se 21 odvija na Fakultetu. Programi su prikazani u Tablici 2.

U Tablici 3. prikazani su programi drugih institucija u koje su uključeni projekti s FKIT-a.

Ukupno pet znanstvenih projekata s FKIT-a u sustavu MZOŠ-a djeluje samostalno. (Tablica 4.)

Tablica 2. Znanstveni programi u sustavu MZOŠ na kojima je FKIT nositelj

Naziv programa	Voditelj	Broj projekata	Broj projekata s FKIT-a
Kemijsko inženjerstvo u naprednim tehnologijama	Zoran Gomzi	7	7
Novi materijali ciljanih svojstava (NOMACIS)	Hrvoje Ivanković	5	3
Modifikacija površina u multifunkcionalnim polimernim sustavima	Jasenska Jelenčić	8	4
Razvoj novih tehnologija za obradu voda	Natalija Koprivanac	3	2
Modificiranje i oplemenjivanje metalnih površina	Ema Stupnišek Lisac	4	2
Istraživanje i razvoj postupaka analize i pročišćavanja voda	Laszlo Sipos	3	3
UKUPNO			
		30	21

Tablica 3. Znanstveni programi u sustavu MZOŠ na kojima sudjeluju projekti s FKIT-a

Naziv programa	Ustanova nositelj	Broj projekata s FKIT-a
Integrativna genomika i proteomika u istraživanju raka	Institut "Ruđer Bošković", Zagreb	3
Dizajn, sinteza i reaktivnost (bio)organskih molekularnih sustava	Institut "Ruđer Bošković", Zagreb	1
Novi funkcionalni materijali	Institut "Ruđer Bošković", Zagreb	1
Novi materijali u građevinarstvu	Građevinski fakultet, Zagreb	1
Održivo gospodarenje energetskim mineralnim sirovinama u Hrvatskoj	Rudarsko-geološko-naftni fakultet, Zagreb	1
Hrvatska standardnojezična leksikologija i leksikografija	Institut za hrvatski jezik i jezikoslovlje, Zagreb	1
UKUPNO		
		8

Tablica 4. Projekti Fakulteta kemijskog inženjerstva i tehnologije izvan programa

Naziv projekta	Voditelj	Znanstveno područje / polje
Istraživanje, razvoj i ocjena polimernih kompozita za primjenu u građevinarstvu	Zlata Hrnjak-Murgić	Tehničke znanosti / Kemijsko inženjerstvo
Biokatalizatori i biotransformacije	Đurđa Vasić-Rački	Biotehničke znanosti / Biotehnologija
Primjena biološke imobilizacije za uklanjanje nitrata iz površinskih voda	Lucija Foglar	Tehničke znanosti / Kemijsko inženjerstvo
Razvoj novih senzora za mjerenje biološki važnih analita	Stjepan Milardović	Prirodne znanosti / Kemija
Kemijski senzori s luminiscentnim poluvodičkim nanokristalima (Quantum Dots)	Ivana Murković Steinberg	Prirodne znanosti / Kemija
UKUPNO		
		5

PROGRAM

KEMIJSKO INŽENJERSTVO U NAPREDNIM TEHNOLOGIJAMA

NOSITELJ

Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije

VODITELJ

Zoran Gomzi

OPIS PROGRAMA

Današnja razina kemijske tehnologije zahtijeva velike strukturne promjene, kako u istraživanjima novih, naprednih ili održivih tehnologija, tako i u restrukturiranju postojećih s obzirom na sve strože kriterije u zaštiti okoliša. Pri tome kemijsko inženjerstvo ima bitnu ulogu u multidisciplinarnom, višerazinskom pristupu rješavanju složenih sustava, što omogućuje dublju integraciju osnovnih fizičkih i kemijskih principa s praktičnom metodologijom pri stvarnoj izvedbi procesa. Cilj ovog programa nalazi se u istraživanjima u pojedinim granama kemijskog inženjerstva kojima je zajednička osnova da pridonose razvoju naprednih tehnologija uz integrirani pristup zaštiti okoliša. To je sadržano u: novim procesima odsumporavanja u motornim gorivima, razvoju katalitičkih postupaka za smanjenje emisija štetnih tvari u okoliš, aerobnom kompostiranju čvrstog otpada i optimiranju svojstava kopolimera. Dio projekata odnosi se na temeljna kemijsko-inženjerska istraživanja: Analiza i modeliranje kemijskih reaktora, Modeliranje procesa u heterogenim sustavima te Softverski senzori i analizatori za motrenje i vođenje procesa. Rezultat koji se očekuje kroz rad u programu je objedinjeni pristup, odnosno metodologija bez obzira o kojem se segmentu istraživanja sadržanom u pojedinom projektu radi. Pri tome će se ostvariti uska suradnja između istraživača u pojedinim projektima, što će omogućiti i bolje rješavanje postavljenih ciljeva. Znanstveni doprinos istraživanja definiran u pojedinim projektima moći će se vrednovati, odnosno provjeriti dvojako. Prvi način je prezentiranje rezultata istraživanja domaćoj i međunarodnoj znanstvenoj javnosti objavljivanjem radova i prisustvovanjem na znanstvenim skupovima u zemlji i inozemstvu. Nadalje, rezultati istraživanja trebaju se vrednovati i s obzirom na njihovu iskoristivost u praksi, što znači da bi se trebali ugraditi u projekte, studije ili elaborate kroz ugovore ili suradnju s partnerima iz privrede. Važnost istraživanja proizlazi iz činjenice da bilo koja nova tehnologija, kao i obnovljena stara, mora biti u skladu s općim svjetskim trendom današnjeg razvoja, znači u skladu s kriterijima održivog razvoja uz primjenu suvremenih znanstvenih spoznaja. Osim općeg znanstvenog doprinosa, istraživanja ostvarena programom kroz studije i projekte predstavljala bi doprinos razvoju i napretku domaće privrede, odnosno konkretno, u primjeni kemijskog inženjerstva pri uvođenju novih ili restrukturiranju postojećih kemijskih tehnologija.

>>

PROJEKTI

Aktivni projekti na programu Kemijsko inženjerstvo u naprednim tehnologijama

- | | |
|------------------|--|
| 125-1251963-1964 | Softverski senzori i analizatori za motrenje i vođenje procesa
Voditelj: Nenad Bolf |
| 125-1251963-1968 | Aerobno kompostiranje čvrstog otpada u reaktorskom sustavu
Voditelj: Felicita Briški |
| 125-1251963-1972 | Procesna svojstva disperznih sustava
Voditelj: Antun Glasnović |
| 125-1251963-1974 | Analiza i modeliranje kemijskih reaktora
Voditelj: Zoran Gomzi |
| 125-1251963-1980 | Optimiranje svojstava kopolimera u procesima usmjerenih
radikalnih polimerizacija
Voditelj: Ante Jukić |
| 125-1251963-2573 | Primjena katalize u zaštiti okoliša
Voditelj: Stanka Zrnčević |
| 125-1251963-2580 | Napredni procesi odsumporavanja ugljikovodičnih goriva
Voditelj: Katica Sertić-Bionda |

Napomena:

Svi projekti na programu izvode se na Fakultetu kemijskog inženjerstva i tehnologije i pripadaju području Tehničkih znanosti, polje Kemijsko inženjerstvo.

Projekt 125-1251963-1964

Softverski senzori i analizatori za motrenje i vođenje procesa

Voditelj: Nenad Bolf

Sažetak: Jedan od čestih problema što se javljaju kod motrenja i vođenja procesa je nemogućnost kontinuiranog mjerenja i analize ključnih procesnih veličina, posebice kad se radi o sastavima procesnih struja i svojstvima proizvoda. Razvoj naprednih senzora, što se temelje na novim tehnologijama analitičke kemije i suvremenim elektroničkim napravama, važno je područje znanstvenog istraživanja, ali je cijena njihovog razvoja vrlo visoka. Softverski senzori (*virtual soft sensors, soft analyzers*) su modeli koji služe za procjenu nemjerljivih stanja procesa na temelju dostupnih mjerenja ulaznih i izlaznih veličina. Pri tome se za zaključivanje o vrijednostima teško mjerljivih procesnih varijabli koriste lako mjerljive sekundarne veličine. Razlozi za primjenu softverskih senzora su nemogućnost mjerenja u realnom vremenu zbog nepostojanja odgovarajućih instrumenata, dugo vrijeme obrade i analize podataka, prevelik trošak instaliranja i održavanja osjetila. Softverski senzori danas postaju područje velikog interesa i važna alternativa skupim *on-line* mjerenjima, gdje se na osnovi analitičkih i empirijskih modela može zaključivati (tj. predviđati) o vrijednostima teško mjerljivih veličina. Umjetne neuronske mreže nalaze veliku primjenu na ovom području, posebice kod modeliranja kompleksnih i nelinearnih procesa pri čemu se povezuju sa statističkim metodama za identificiranje i primjenjuju se u svrhu optimiranja procesa. Metode kemometrije također su direktno povezane sa softverskim sensorima, a obuhvaćaju postupke analize informacija procesnih analizatora (spektrofotometrija, kromatografija) u svrhu analize, modeliranja i vođenja procesa. U predloženom istraživanju primjenjivat će se navedene metode i područja istraživanja, kako bi se razvili modeli softverskih senzora i na njima temeljeno inferencijsko vođenje procesa. Mogućnosti primjene predloženih istraživanja su široke, posebno u procesnoj industriji, ali i u drugim područjima, primjerice u biokemijskim istraživanjima, pa će se intenzivno raditi i na prijenosu spoznaja i znanja za praktičnu primjenu. Kao rezultat istraživanja predviđa se primjena razvijenih softverskih senzora i postupaka inteligentnih mjerenja na primjerima: a) poboljšanja djelovanja i vođenja rafinerijskih procesa (HDS, destilacija); b) procesa polimerne i petrokemijske industrije; c) procesa obrade biološkog otpada (laboratorijsko pilot postrojenje); d) procesa obrade otpadnih voda (denitrifikacija) i pročišćavanja zraka (oksidacija VOCs).

Projekt 125-1251963-1968

Aerobno kompostiranje čvrstog otpada u reaktorskom sustavu

Voditelj: Felicita Briški

Sažetak: Cilj projekta je aerobnim kompostiranjem čvrstog otpada u šaržnom kolonskom reaktoru prevesti organsku tvar u stabilni i ekonomski iskoristivi produkt – kompost. Smjesu plinova na izlazu iz reaktora kao i procjedne vode nastale kompostiranjem treba obraditi biološkim postupkom, kako bi se smanjila emisija štetnih tvari u okoliš. Istraživanja će se provesti u laboratorijskom protočnom adijabatskom kolonskom reaktoru te će se predložiti reaktorski i kinetički model koji će se verificirati dobivenim eksperimentalnim rezultatima. Dobiveni rezultati će se ispitati u većem mjerilu (primijeniti na poluindustrijski reaktor). Kemijsko-inženjerski pristup (eksperimentiranje, modeliranje i simulacija, kontrola procesa i optimiranje) primijenit će se za projektiranje malih kompostana, koje se mogu postaviti u blizini industrijskih i poljoprivrednih kompleksa. Stabiliziranje organskog otpada u aerobnim uvjetima u zatvorenom reaktorskom sustavu je u skladu s načelima zaštite okoliša. Rješavanjem problema zbrinjavanja dijela čvrstog otpada kompostiranjem, Hrvatska bi slijedila trend u razvijanim europskim zemljama.

Projekt 125-1251963-1972

Procesna svojstva disperznih sustava

Voditelj: Antun Glasnović

Sažetak: Tehnološki procesi s heterogenim sustavima (čvrsto-kapljevito; čvrsto-plinovito) zastupljeni su danas u više od 70 % kemijske procesne i srodnih industrija. U cilju dobivanja zahtijevanih faktora kvalitete proizvoda, tehnološki proces je potrebno voditi uz visoku djelotvornost s materijalnog i energetskog stajališta te uzimajući u obzir ekološke aspekte. Za svrhovitu provedbu procesa uz postavljene zahtjeve nužno je razumijevanje pojava na nano- i mikro- razini, a u svrhu dobivanja proizvoda željenih svojstava. Zbog toga je potrebno poznavanje karakteristika disperznih sustava koje su posljedica interakcija disperzne faze (raspodjela veličina čestica i pora, oblik čestica, poroznost, specifična površina, vlažnost, sastav) i kontinuirane faze (gustoća, reološka svojstva, sastav). Predložena istraživanja na ovom projektu nastavak su i proširenje istraživanja na projektu Procesna svojstva disperznih sustava i usmjerena su na modeliranje procesa s disperznim heterogenim sustavima. Pri postupcima s takvim sustavima nužno je opisati promjene u populaciji čvrstih čestica tijekom procesa te se modeliranje procesa temelji na populacijskim bilancama. Predviđena su sljedeća eksperimentalna istraživanja: a) usitnjavanje (suho i mokro) mineralnih sirovina: istražiti će se utjecaj procesnih parametara i reoloških svojstava gustih suspenzija (muljeva) na kinetiku usitnjavanja; sušenje produkta usitnjavanja; b) granuliranje dolomita i drugih industrijski važnih praškastih materijala uz različita veziva u fluidiziranom sloju uključujući i proces sušenja dobivenih granula. Sustav je odabran zbog postojanja potreba za proizvodnju granula koje se koriste u svrhu neutralizacije kiselih zemljišta; c) kristalizacija, šaržna i kontinuirana, sušenje dobivenih kristala: istraživanje utjecaja procesnih parametara na kinetiku kristalizacije i raspodjelu veličina i oblik kristala, te na kinetiku sušenja dobivenih kristala. Analizom dobivenih rezultata u navedenim procesima izvjest će se matematički modeli koji opisuju proces, na temelju kojih je moguće predvidjeti svojstva dobivenih produkata. Izvedeni modeli provjerit će se usporedbom s eksperimentalnim rezultatima.

Projekt 125-1251963-1974

Analiza i modeliranje kemijskih reaktora

Voditelj: Zoran Gomzi

Sažetak: Kemijski reaktori su polazna osnova pri izvedbi cjelokupnog tehnološkog procesa te njegov izbor obično određuje i ostalu procesnu opremu i uređaje. Na današnjoj razini tehnološkog razvoja postoji snažan zahtjev za poboljšanim izvedbama reaktora kojima bi se postigla veća učinkovitost cijelog procesa. To se odnosi na: a) integraciju reaktora i separacijskih procesnih jedinica u sukladnu cjelinu radi veće energetske i proizvodne učinkovitosti; b) primjenu novih tipova reaktora s obzirom na sve strože zahtjeve zaštite radne sredine i okoliša; c) izbor optimalnih radnih uvjeta i samog reaktora s obzirom na uvođenje novih tehnologija (novi katalizatori, novi putevi dobivanja produkata, uvođenje i dobivanje novih materijala); d) izbor i izvedbu optimalnog sustava kontrole i vođenja baziranog na suvremenim računalnim mogućnostima. Matematičko modeliranje kemijskih reaktora osigurava nužne pretpostvake za provjeru, simulaciju i ocjenu predloženih rješenja u smislu konačnog izbora i definiranja radnih uvjeta. Polazna osnova je predlaganje takvog modela koji na osnovi fizičke slike može pouzdano ocijeniti pretpostavke sadržane u njegovom izvođenju. Ovim se projektom želi pokazati kako je samo cjelovitim, integriranim pristupom moguće zadovoljiti današnji trend razvoja kemijskih reaktora i omogućiti njihovu primjenu u naprednim tehnologijama. U ovom projektu osnovna istraživanja su sadržana u: analizi eksperimenata usmjerenih na provjeru kinetičkih modela, izboru reaktora na osnovi zadanih pretpostavki o procesu, izvođenju matematičkog modela reaktora uzimajući u obzir sve relevantne značajke (bilance tvari i topline, hidrodinamiku, kinetiku, prisutnost katalizatora, ograničenja s obzirom na

radne uvjete), provjeri modela simulacijom s rezultatima iz realnih procesa, odnosno reaktora – bilo eksperimentalnih, bilo industrijskih, predlaganju optimalnog izbora parametara sadržanih u modelu kao i prijedlog optimalnih radnih uvjeta. Očekivani rezultati projekta nalaze se u predlaganju takovih matematičkih modela reaktora koji se mogu neposredno primijeniti pri izvedbi i projektiranju izabranih naprednih tehnologija. Također, ti modeli mogu biti podloga za razvoj softverskih alata kojima bi se simulirao i optimirao rad cjelovitog procesa, a bitni su i za razvoj odgovarajuće softverske podrške pri vođenju spomenutih procesa.

Projekt 125-1251963-1980

Optimiranje svojstava kopolimera procesima usmjerenih radikalnih polimerizacija

Voditelj: Ante Jukić

Sažetak: Reakcije i procesi radikalnih polimerizacija temeljni su i najviše upotrebljavani tehnološki postupci dobivanja polimernih materijala. Izrazitih su prednosti prema ionskim i koordinativnim polimerizacijama zbog jedostavnije tehničke provedbe i dobivanja polimernih materijala uravnoteženih svojstava. Međutim, obzirom na njihov mehanizam i kinetiku, nije moguće istovremeno postići veliku brzinu i doseg reakcije i zahtijevanu veliku molnu masu nastalog polimera. U zadnje vrijeme obavljaju se opsežna istraživanja usmjerenih radikalnih polimerizacija, posebice iniciranih nitroksidnim radikalima i uz prisustvo kompleksa prijelaznih metala, a najveće primjenske mogućnosti pokazuju novi diperoksidni inicijatori. Takvi inicijatori pri određenim procesnim uvjetima daju veće brzine polimerizacije, kraće vrijeme postizanja potpune konverzije monomera i visoke molne mase polimera uz razmjerno niske polidisperznosti. Međutim, ta su se istraživanja do sada uglavnom odnosila na homopolimerizacijske sustave. U predloženom istraživačkom projektu, kao nastavak vlastitog dosadašnjeg rada, obavit će se sveobuhvatna istraživanja dobivanja polimera posebnih svojstava reakcijama usmjerenih radikalnih kopolimerizacija uz diperoksidne inicijatore. Istraživanja će obuhvatiti sustave binarnih i ternarnih kopolimerizacija konvencionalnih monomera stirena, metil-metakrilata, anhidrida maleinske kiseline, kao i cijepljenih kopolimerizacija poliolefina, s funkcionalnim monomerima, pretežito dugolančanih estera metakrilne kiseline i estera s polarnim skupinama kao što su N-dimetilaminoetil-metakrilat i tetrahidrofurfuril-metakrilat, a zatim supstituiranim N-fenil i N-alkil maleimidima, uz diperoksidne inicijatore 2,5-dimetil-2,5-di(2-etilheksanoil peroksi) heksan i 1,1-di(tert-butilperoksi)-3,3,5-trimetil cikloheksan. Primjena kinetičkih modela i utvrđene međuovisnosti reakcijsko-procesnih uvjeta i strukture omogućit će optimiranje procesa i željenih svojstava kopolimera u složenim sustavima. Za očekivati je da će navedena istraživanja dovesti kako do povećanja saznanja o povezanosti reakcijskih uvjeta polimerizacija uz diperoksidne inicijatore, sastava i strukture monomera i građe dobivenih kopolimera, tako i do novih vrsta polimera prestižnih primjenskih svojstava, posebice poboljšavala reoloških svojstava kapljevine, mješljivosti polimernih smjesa i kompozita, i podnošljivosti bioloških i sintetičkih polimernih materijala.

Projekt 125-1251963-2573

Primjena katalize u zaštiti okoliša

Voditelj: Stanka Zrnčević

Sažetak: Kataliza igra vrlo važnu ulogu u rješavanju problema vezanih za zaštitu okoliša. Uporabom katalitičkih tehnologija štiti se ozonski omotač, sprječava nastajanje efekta staklenika, rješavaju ekološki problemi vezani uz transport i proizvodnju energije, omogućava pretvorba obnovljivih sirovina (primjerice biomase) u korisne kemikalije, čiste se za okoliš štetne emisije iz kemijskih, petrokemijskih i drugih industrija, te omogućava razvoj održivih tehnologija. Moguće je zaključiti da se uporabom katalizatora mogu riješiti problemi vezani za onečišćenje okoliša što predstavlja značajan poticaj za daljnja istraživanja u tom području. Glavni cilj predloženog projekta je stvoriti osnove za razvoj katalitičkih postupaka koji se rabe za smanjenje emisije štetnih tvari u okoliš (NO_x , VOCs, CO, krutih čestica koje nastaju

sagorijevanjem dizelskih goriva), te održivih kemijski i srodnih procesa kojima se štedi energija i sirovine, te imaju neznatan utjecaj na okoliš. Pristup istraživanjima bit će interdisciplinaran, povezujući kemiju čvrstog stanja s fizikalnom kemijom i kemijskim inženjerstvom. Proučavajući odnos strukturnih i kemijskih značajki katalizatora te njegovih katalitičkih značajki, tj. aktivnosti, selektivnosti i stabilnosti dobit će se osnova za njegovu izvedbu. Karakterizacija katalizatora i teoretsko modeliranje rabiće se za dobivanje informacija potrebnih za racionalnu izvedbu katalizatora. Istraživanja u području reakcijskog inženjerstva bit će usmjerena na optimiranje odnosa između kemijske reakcije te fizičkih procesa prijenosa tvari i energije u katalitičkom sustavu. Razumijevanje međuzavisnosti ovih elementa od temeljne je važnosti za razvoj novih ili unaprjeđenje postojećih katalizatora kojima se mogu riješiti problemi vezani uz zaštitu okoliša. Važnost predloženog istraživanja je dvojak. S fundamentalnog stanovišta, određivanjem aktivnosti katalizatora, tj. brzine reakcije može se dobiti uvid u mehanizam reakcije (oksidacija VOCs, redukcija NO_x, niskotemperaturna oksidacija CO, mokra oksidacija fenola, oksidacija krutih čestica, hidroobrada), dok je s izvedbenog stanovišta omogućen odabir najboljeg katalizatora za dani proces, uvećanje usmjereno k industrijskoj primjeni, te optimiranje katalitičkih procesa. Dobiveni rezultati bit će objavljeni u domaćim i inozemnim časopisima te prikazani na skupovima.

Projekt 125-1251963-2580

Napredni procesi odsumporavanja ugljikovodičnih goriva

Voditelj: Katica Sertić-Bionda

Sažetak: Tijekom protekla tri desetljeća zahtjevi prema kapljevitim ugljikovodičnim gorivima, a posebno prema motornim benzinima i dizelskim gorivima, znatno su povećani uslijed sve strožih propisa glede zaštite okoliša. Najvažniji zadatak u proizvodnji i primjeni takvih goriva je smanjenje sadržaja ekološki štetnih spojeva kao što su spojevi sumpora i dušika te aromatskih ugljikovodika, posebice benzena. Uklanjanje spojeva koji sadrže sumpor i dušik uobičajeno se zbiva istovremeno tijekom tzv. procesa hidrodesulfurizacije (HDS) na povišenim temperaturama i tlakovima vodika, primjenom Co-Mo/Al₂O₃ katalizatora. HDS proces je vrlo učinkovit za uklanjanje alifatskih sulfida, ali je manje učinkovit za tiofene i njegove derivate, tzv. refrakcijske sumporove spojeve, koji znatno otežavaju "duboko" odsumporavanje. U nekoliko nedavno objavljenih preglednih radova utvrđeno je da je vrlo teško primjenom konvencionalne tehnologije smanjiti sadržaj sumporovih spojeva prema zahtjevima za izrazito čista kapljevita goriva. Napredni procesi odsumporavanja obuhvaćaju istraživanja uklanjanja sumporovih spojeva na vrijednosti manje od 10 mg/kg, što je u skladu s EU propisima, a mogu se razvrstati u dvije skupine: selektivnu adsorpciju i kapljevinu ekstrakciju. Temeljni cilj predloženog istraživačkog projekta je razviti procesa učinkovitog odvajanja sumporovih spojeva iz motornih goriva selektivnom adsorpcijom pomoću posebnih vrsta zeolita, aktivnih ugljena, metala i metalnih oksida, kao i procesa kapljevine ekstrakcije selektivnim otapalima, poput sulfolana, furfurala, itd. Učinkovitost tih postupaka bit će ispitana u kombinaciji s konvencionalnim HDS procesom. Opisana istraživanja obuhvaćaju prvenstveno identifikaciju refrakcijskih sumporovih spojeva, odabir selektivnog adsorbensa, kao i otapala, i optimizaciju parametara ovih procesa. Sljedeća eksperimentalna istraživanja obuhvatit će metode i uvjete procesa obnavljanja adsorbensa i otapala. Daljnji cilj predloženog projekta, kao nastavak dosadašnjih istraživanja, utvrđivanje je optimalnih parametara procesa reformiranja, izomerizacije i katalitičkog kreiranja, kako bi se, uz sumporove spojeve, smanjio i sadržaj aromatskih ugljikovodika, uz zadržavanje primjenskih svojstava. Primjenom kemijsko-inženjerskih principa u modeliranju i vođenju procesa omogućit će se povezivanje primjenskih i ekoloških čimbenika proizvodnje ugljikovodičnih motornih goriva.

PROGRAM

NOVI MATERIJALI CILJANIH SVOJSTAVA (NOMACIS)

NOSITELJ

Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije

VODITELJ

Hrvoje Ivanković

OPIS PROGRAMA

Napredak industrije i zdravlje nacionalne ekonomije počivaju na stalnom otkrivanju, razvoju i primjeni novih materijala. Stoga je, da bi se osigurao ekonomski rast, u tom području potrebno dosegnuti prikladnu razinu znanja. Hrvatska ima vrlo aktivne i znanstveno izvrsne istraživačke skupine u području naprednih materijala koje, međutim, zbog slabe koordinacije djelovanja većinom nisu uključene u integriranu sinergijsku suradnju. Svrha predloženog programa stvaranje je jezgre znanstvenika čije bi vještine i kompetencije obuhvaćale sve potrebno za inovativno i napredno istraživanje u području novih, naprednih materijala. Program povezuje 6 projekata i kombinira izvrsnost u različitim znanstvenim područjima uključujući: kemiju, znanost o materijalima i inženjerstvo materijala, kemijsko inženjerstvo i biomedicinu. Čvrsto vjerujemo da će program osnažiti znanstveni potencijal svih partnera, kako zbog povećane djelatnosti intelektualnog rada, tako i zbog proširene dostupnosti istraživačke opreme. Eksperimentalni dio projekata čini priprava i karakterizacija novih materijala različite morfologije i dobro definirane strukture, primjenjivih u područjima poput inženjerstva tkiva, biosenzora, katalizatora, prevlaka, ali i u zbrinjavanju otpada i zaštiti okoliša. Silu poveznicu ovog programa tvori jedinstvenost koncepta (integracije znanstvene i inženjerske metodologije), koji polazi od prirodnih znanosti, uključuje inženjerska (termodinamika, kinetika) i osnovna procesna znanja i završava karakterizacijom materijala ciljanih svojstava. Koncept se primjenjuje na: (1) istraživanje novih putova pripreme visokoporozne hidroksiapatitne keramike; (2) sintezu keramičkih nanokompozita i organsko-anorganskih hibrida sol-gel procesima; (3) pripravu nanokompozita na osnovi polimerne matrice i slojevitih minerala; (4) istraživanje vodenih otopina polimera i hidrogelova; (5) razvoj novih senzora za određivanje biološki važnih analita i (6) razvoj ekološki održivih cementnih materijala. Očekuje se da će program doprinijeti boljem razumijevanju sinteze, strukture i svojstava novih materijala za različite namjene. Prikupljeno će se znanje prenositi novim naraštajima znanstvenika i inženjera; tako će se stvarati osnovne pretpostavke za sveukupni napredak industrije u zemlji.

>>

PROJEKTI

Aktivni projekti na programu Novi materijali ciljanih svojstava (NOMACIS)

- 125-1252970-3005 Biokeramički, polimerni i kompozitni nanostrukturirani materijali
Voditelj: Hrvoje Ivanković
Naslovna institucija: Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije
- 011-1252970-2254 Cementni kompoziti i stabilizacija štetnih otpada
Voditelj: Petar Krolo
Naslovna institucija: Kemijsko-tehnološki fakultet, Split
- 125-1252970-2981 Keramički nanokompoziti dobiveni sol-gel postupkom
Voditelj: Stanislav Kurajica
Naslovna institucija: Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije
- 125-1252970-2983 Razvoj modela procesa hidratacije
Voditelj: Tomislav Matusinović
Naslovna institucija: Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije
- 011-1252970-2252 Primjena letećeg pepela u novim anorganskim vezivnim materijalima
Voditelj: Jelica Zelić
Naslovna institucija: Kemijsko-tehnološki fakultet, Split

Napomena:

Svi projekti na programu pripadaju području Tehničkih znanosti, polje Kemijsko inženjerstvo.

Projekt 125-1252970-3005

Biokeramički, polimerni i kompozitni nanostrukturirani materijali

Voditelj: Hrvoje Ivanković

Sažetak: Materijali su od početaka civilizacije imali ključnu ulogu u njenom rastu, blagostanju, sigurnosti i kvaliteti ljudskog življenja. Gotovo svakom od glavnih tehnoloških skokova prethodio je napredak u tehnologiji materijala, koji se pokazao presudnim za održavanje vitalnosti ekonomije. Neka od najzbudljivijih istraživanja što utiru nove znanstvene putove usmjerena su na nano- i/ili biomaterijale. Pod nanostrukturiranim materijalima podrazumijevaju se materijali znate ili slojevite strukture, sastavljeni od gradivnih čestica (zrna, kristalita ili pak slojeva) u području dimenzija od 1 do 100 nm. Takve ultrafine mikrostrukture pokazuju nova, tehnološki zanimljiva svojstva. Glavna zadaća našeg projekta je razvoj i ispitivanje novih nanostrukturiranih materijala primjenjivih u područjima kao što su inženjerstvo tkiva, kontrolirano doziranje lijekova, biosenzori, heterogeni katalizatori ili prevlake posebnih svojstava. Projektni zadaci ostvarit će se u skladu s najnovijim istraživačkim smjernicama; konkretni problemi rješavat će se u okviru sljedećih četiriju tematskih skupina: (1) istraživanje novih putova sinteze visokoporozne hidroksiapatitne keramike za pripremu anorgansko-organskih strukturnih skeleta na osnovi bioaktivnog hidroksiapatita i biorazgradivih polimera, odnosno heterogenih katalizatora na hidroksiapatitnom nosaču; (2) dizajniranje i karakterizacija novih sol-gel hibrida za pripremu prevlaka, odnosno strukturnih skeleta posebnih svojstava te uspostavljanje ključne korelacije između njihovih svojstava i funkcije; (3) priprema i karakterizacija nanokompozita na osnovi polimerne matrice i organski-modificiranih prirodnih, odnosno sintetskih slojevitih minerala; (4) istraživanje mješljivosti i interakcija u višekomponentnim, vodenim polimernim otopinama, odnosno hidrogelovima. Istraživanje će se unutar svakog dijela projekta organizirati prema jedinstvenoj shemi: hipoteza, model, mjerenje, karakterizacija, prilagodba modela eksperimentalnim podacima, promjena (optimiranje) procesnih parametara, željeni proces/materijal/svojstva. Uspješnim ostvarenjem ovog projekta povećat će se opća razina nastavne i znanstvene osposobljenosti suradnika. Prikupljeno će se znanje prenositi novim naraštajima inženjera, stvarajući osnovne pretpostavke sveobuhvatnog napretka industrije u zemlji.

Projekt 125-1252970-2981

Keramički nanokompoziti dobiveni sol-gel postupkom

Voditelj: Stanislav Kurajica

Sažetak: Keramički nanokompoziti i nanokristalinični materijali pokazuju, u usporedbi sa svojim mikrokristaliničnim pandanima, umnogome različita termička, električna, mehanička i optička svojstva, zbog čega istraživanje ovih materijala privlači veliku pozornost. Da bi se takovi inovativni materijali s ciljanim strukturnim i mikrostrukturnim karakteristikama kreirali, potrebno je provesti cjelovito istraživanje koje će se sastojati od osmišljavanja materijala, sinteze, termičke obrade, proučavanja strukture i kinetičke karakterizacije. Istraživat će se tri vrste novih materijala dobivenih sol-gel postupkom: (1) keramički nanokompoziti s mulitom ($Al^{VI}_2[Al^{IV}_{2+2x}Si_{2-2x}O_{10-x}]$) kao osnovnom fazom u kombinaciji sa spojevima cinka i lantana; (2) nanokristalinična ganitna ($ZnAl_2O_4$) keramika; (3) kalcijev aluminat ($CaAl_2O_4$) s malom količinom europija u strukturi. Projekt se sastoji od optimizacije procesa sol-gel sinteze, što uključuje kontrolu stehiometrijskih odnosa te uvjeta sinteze, načina sušenja i starenja gela te procesa termičke obrade gela, sve sa ciljem kristalizacije ciljanih kristalnih faza željene mikrostrukture i svojstava. Proučavat će se i tijek procesa kristalizacije, strukture i mikrostrukture dobivenih materijala te kinetički parametri procesa kristalizacije. Također će se istraživati procesi sinteriranja ili nanošenja na supstrat, načini obrade te svojstva važna za pojedine materijale. Posebna će se pozornost posvetiti utjecaju unesenih stranih iona na ponašanje gela pri termičkoj obradi te tijek kristalizacije gela. Očekivani rezultati istraživanja su optimizirani i ponovljivi procesi sinteze te definirani postupci termičke obrade gelova čime nastaju keramički materijali kontroliranog faznog sastava i mikrostrukture s poznatim kinetičkim parametrima procesa kristalizacije. Predviđa se da će dobiveni materijali biti značajni u području proizvodnje heterogenih katalizatora, ravnih ekrana, keramičkih glazura i luminiscentnih materijala.

Voditelj: Tomislav Matusinović

Sažetak: Iako hidratacija aluminatnog cementa predstavlja proces od temeljne industrijske i komercijalne važnosti, kemijske reakcije pri hidrataciji nedovoljno su razjašnjene. Opći je cilj projekta prijenos znanstvenog znanja prema gospodarstvu. Znanja stečena našim dugogodišnjim znanstvenim istraživanjima mehanizma brzog vezanja i očvršćivanja aluminatnog cementa, znanja o faznom sastavu, odnosu struktura, svojstava i reaktivnosti te znanja o motrenju i vođenju procesa, omogućit će dodatno stjecanje znanja o procesu i kvalitetnijem studiju procesa hidratacije. Glavni je cilj istraživanja izrada modela procesa hidratacije, razvoj nove metode kontinuiranog određivanja izotermne topline hidratacije i toplinskih svojstava cementnog materijala, razvoj linearne korelacije između makroskopskih svojstava cementnog materijala i parametara ultrazvučnog signala kao posljedice interakcije vala i mikrostrukture, provođenje eksperimentalnog istraživanja procesa proizvodnje aluminatnog cementa *in situ*, uz proučavanje primjene metoda umjetne inteligencije (živčevne mreže) kao modela za proučavanje novih načina vođenja procesa i razvoj poboljšane metode. U predloženom projektu je znanstvenoistraživački rad u funkciji razvoja održivih tehnologija i proizvodnji kvalitetnijeg proizvoda, te je važan element za povećanje djelotvornosti procesa i poslovne učinkovitosti cjelokupnog nacionalnog razvoja i povećanja međunarodne konkurentnosti hrvatskog gospodarstva. Predložena istraživanja posebice su važna za školovanje mladih znanstvenika, budući da s područja predloženog istraživanja troje suradnika rade doktorske disertacije.

OPIS PROGRAMA

Multifunkcionalni polimerni sustavi predstavljaju materijale budućnosti s izrazito poboljšanim i/ili potpuno novim svojstvima, gdje se postižu kombinacije svojstava koje nisu prisutne u standardnim materijalima i stoga njihova primjena ima veliko znanstveno, tehnološko i potencijalno ekonomsko značenje. Program ima za cilj sustavno istraživanje i proizvodnju novih ekološki i ekonomski opravdanih materijala multifunkcionalnih svojstava uz produljen vijek trajanja. Zajednička hipoteza programa je ciljana modifikacija i karakterizacija površina u multifunkcionalnim polimernim sustavima raznim postupcima površinske obrade različitim dodacima (plastomernim, elastomernim, bitumenom, mikro- i nanopunilima, kompatibilizatorima, enzimima, stabilizatorima, biorazgradljivim dodacima), što rezultira novim svojstvima zbog porasta interakcija i sinergističkog djelovanja komponenata. Molekularno modeliranje i simulacija strukture i svojstava površina i materijala u cjelini, mehanizama permeacije, otvrdnjavanja, starenja i vijeka trajanja daje mogućnost teoretskih predviđanja kao komplement eksperimentalnih istraživanja. Kao rezultat istraživanja i razvoja odgovarajućih procesa modifikacije, pripreme i kompatibilizacije multifunkcionalnih polimernih materijala postići će se homogena morfologija kao preduvjet efektivne adhezije i ciljanog kreiranja strukture te poboljšanih i/ili novih svojstava. Interdisciplinarnim zajedništvom, kombinirajući kvalitetno znanje iz više znanstvenih područja (tehničkog, biotehničkog i prirodnog) i znanstvenih polja (kemijsko inženjerstvo, materijali, tekstilna tehnologija, prehrambena tehnologija, grafička tehnologija, ekologija i fizika), postići će se glavni cilj programa. Izvornost i interdisciplinarnost dovest će do razvoja i proširenja znanja o multifunkcionalnim polimernim sustavima i njihovim tehnologijama dobivanja za konkretnu upotrebu u gospodarstvu RH, a u skladu s preporukama europske znanstvene zajednice. Krajnji je cilj okupiti grupu istraživača i inženjera koja bi imala sva potrebna znanja i vještine u analitičkim i eksperimentalnim metodama, kako bi se postigla svjetska razina tehnologije u području materijala. Time će se omogućiti edukacija mladih istraživača koji će moći uspješno odgovoriti na zadane ciljeve i visoke zahtjeve u području istraživanja polimernih sustava. Prepoznatljivost znanstvenog tima bit će ostvarena i objavljivanjem znanstvenih dostignuća dostupnih javnosti u međunarodno priznatim bazama podataka.

>>

PROJEKTI

Aktivni projekti na programu Modifikacija površina u multifunkcionalnim polimernim sustavima

- 058-1252971-2805 Permeacijska svojstva nekih polimernih materijala za pakiranje hrane
Voditelj: Kata Galić
Znanstveno područje / Polje: Biotehničke znanosti / Prehrambena tehnologija
Naslovna institucija: Prehrambeno-biotehnološki fakultet, Zagreb
- 117-1252971-1367 Međupovršinske pojave aktivnih multifunkcijskih tekstilnih materijala
Voditelj: Anamarija Grancarić
Znanstveno područje / Polje: Tehničke znanosti / Tekstilna tehnologija
Naslovna institucija: Tekstilno-tehnološki fakultet, Zagreb
- 125-1252971-3033 Razvoj inovativnih višefunkcionalnih polimernih mješavina
Voditelj: Jasenka Jelenčić
Znanstveno područje / Polje: Tehničke znanosti / Kemijsko inženjerstvo
Naslovna institucija: Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije
- 011-1252971- 2249 Polimerne mješavine s biorazgradljivim komponentama
Voditelj: Tonka Kovačić
Znanstveno područje / Polje: Tehničke znanosti / Kemijsko inženjerstvo
Naslovna institucija: Kemijsko-tehnološki fakultet, Split
- 125-1252971-2575 Inženjerstvo površina i međupovršina nanočestica u adhezijskim nanomaterijalima
Voditelj: Mirela Leskovac
Znanstveno područje / Polje: Tehničke znanosti / Kemijsko inženjerstvo
Naslovna institucija: Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije
- 125-1252971-2578 Modifikacija i stabilnost višefaznih polimernih sustava
Voditelj: Vesna Rek
Znanstveno područje / Polje: Tehničke znanosti / Kemijsko inženjerstvo
Naslovna institucija: Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije
- 192-1252971-1982 Istraživanje procesa starenja i predikcija životnog vijeka materijala
Voditelj: Muhamed Sućeska
Znanstveno područje / Polje: Tehničke znanosti / Kemijsko inženjerstvo
Naslovna institucija: Brodarski institut d.o.o., Zagreb
- 125-1252971-2868 Vibracijska dinamika i struktura multifunkcionalnih polimernih sustava
Voditelj: Vesna Volovšek
Znanstveno područje / Polje: Prirodne znanosti / Fizika
Naslovna institucija: Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije

Projekt 125-1252971-3033

Razvoj inovativnih višefunkcionalnih polimernih mješavina

Voditelj: Jasenka Jelenčić

Sažetak: Znanstvena dostignuća u području polimernih mješavina i nanokompozita u sljedećih će desetak godina imati značajan utjecaj na različite industrijske grane. U skladu s tom činjenicom projekt obuhvaća razvoj procesa prerade postojećih polimernih materijala s ciljem modifikacije njihovih svojstava i dobivanja inovativnih materijala. Cilj je prevladati nedostatke polimernih mješavina i/ili nanokompozita koji nastaju uslijed njihove nemješljivosti. Problem nemješljivosti može se prevladati dodatkom odgovarajućeg kompatibilizatora (blok ili graft kopolimer, međufazno kemijsko povezivanje s lako reaktivnim tvarima) koji može uspostaviti molekularne interakcije i time modificirati uvjete na međufazi. Tada kompatibilizator djeluje kao emulgator i smanjuje međupovršinsku napetost te omogućuje integriranje nemješljivih faza. Upotrebom navedenih oblika kompatibilizacije moguće je postići stabilnu morfologiju i poboljšati svojstva (povećati prekidnu i udarnu čvrstoću, preradljivost, kemijsku otpornost i modificirati propusnost). Nanokompoziti kao nova vrsta polimernih materijala otvaraju nove vidike u području primjene nanotehnologija, a nastaju dodatkom male količine punila karakterističnih nano-dimenzija u polimernu mješavinu kao matricu. Na svojstva nanokompozita također znatno utječe priroda interakcija na međufazi punilo/matrica, za što je vrlo važna kontrola i modificiranje svojstava površine nanočestica. Kontroliranje morfologije i molekularnih interakcija provest će se primjenom odgovarajućih metoda kao što su SEM, DMA, DSC i FTIR. U novije vrijeme, pripremom polimernih mješavina omogućeno je recikliranje industrijskog i/ili komunalnog polimernog otpada, što je od velikog društvenog značaja za održivi razvoj u skladu s postojećim ekološkim propisima. Recikliranje polimernih materijala (PET, LDPE, LLDPE, HDPE) posljednjih je godina u velikom porastu zbog njihove povećane upotrebe. Napor da se smanji, ponovo upotrijebi i reciklira plastični otpad je veliki izazov, a ima za cilj zaštitu okoliša i očuvanje prirodnih neobnovljivih izvora sirovina. Cilj projekta je razumjeti, kreirati i razviti nove složene višefunkcionalne polimerne mješavine i/ili nanokompozite s namjerom proširenja njihovog područja primjene koja je prijateljska za okoliš. Ovakvo koncipiran projekt predstavljat će iskorak u području istraživanja s naglaskom na razvoj inovativnih materijala te prijenos znanja u srodne industrije, što će omogućiti efikasno i uspješno provođenje projekta.

Projekt 125-1252971-2575

Inženjerstvo površina i međupovršina nanočestica u adhezijskim nanomaterijalima

Voditelj: Mirela Leskovic

Sažetak: Nanokompoziti predstavljaju materijale budućnosti s izrazito poboljšanim i/ili potpuno novim svojstvima zbog interakcija ostvarenih na nanorazini. Prethodni rezultati upućuju na potrebu produblivanja znanja slijedom ideje o direktnoj povezanosti međupovršine i konačnih tehničkih svojstava nanomaterijala. Pretpostavka projekta je da se kontrolirano modifikacijom anorganskih nanočestica mijenjaju kemijska, fizikalna i energetska svojstva površine. Na taj je način moguće utjecati na porast interakcija i optimiranje fenomena adhezije na međupovršini nanočestica s polimernom matricom, što vodi do novih multifunkcionalnih svojstava nanomaterijala, tj. porasta inače suprotnih svojstava kao čvrstoće i elastičnosti i/ili žilavosti koja nemaju standardni materijali. Zadaci istraživanja su kontrolirano oblikovanje strukture i svojstava međupovršine u poliuretanskim (PU) i drugim nanokompozitima. Modifikacijom površine nanočestica amorfne precipitirane i pirogene silike, kao i prirodne silike (dijatom) postići će se odgovarajuća funkcionalizacija i promjena površinske energije punila. Modifikacija površine nanočestica punila provest će se odabranim postupcima silaniranja, graftiranja zračenjem i/ili adicijske polimerizacije. Specifični zadatak projekta je novi način pripreme nanokompozita *in situ* postupcima u prisustvu modificiranog nanopunila s namjerom rješavanja problema aglomeracije nanočestica, koji je jedan od važnijih ograničavajućih čimbenika komercijalne primjene nanomaterijala. Postignuta morfologija nanokompozita, mehanička, termička i svojstva stabilnosti dovest će se u vezu sa strukturom i svojstvima međupovršina u nanokompozitu. Ovakav pristup omogućava dobitanje novih materijala specifičnih svojstava. Za istraživanje površine modificiranog punila i međupovršine u kompozitima koristit će se napredne analitičke metode i metode molekularnog modeliranja. Kao konačni rezultat projekta očekuju se novi nanomaterijali izrazito poboljšanih i/ili multifunkcionalnih svojstava. Optimirane formulacije i prototipovi adhezijskih proizvoda, konstrukcijskih ljepila i brtvila, mogli bi predstavljati iskorak u primjeni nanomaterijala za zahtjevne namjene.

Projekt 125-1252971-2578

Modifikacija i stabilnost višefaznih polimernih sustava

Voditelj: Vesna Rek

Sažetak: Razvoj višefaznih polimernih sustava, polimernih mješavina, PM, i polimerom modificiranog bitumena, PMB, smatra se jednim od najvažnijih razvoja na području novih inženjerskih materijala. Miješanje plastomera, P, različitih stupnjeva kristalnosti i polarnosti, kao i P s termoplastičnim elastomerima, TPE, i bitumenom, BIT, rezultira s finalnom morfološkom strukturom, koja ovisi o uvjetima procesiranja mješavina, sastavu i udjelu faza, te modificira graničnu površinu i inženjerska svojstva ovih materijala, odlučujuća za primjenu u konstrukcijama. Sinergističko djelovanje pojedinih sastavnica PM i PMB ne može se postići bez razumijevanja veze između kompozicije PM i PMB, morfološke strukture, faznih interakcija i granične površine, što utječe na toplinska i reološka svojstva te stabilnost mješavina. To je ujedno i hipoteza projekta. Projekt će obuhvatiti sustavna istraživanja novih višefaznih sustava, trokomponentnih PM i PMB. Studirat će se mješavine olefinskih plastomera, olefinskih/stirenskih plastomera, te olefinskih plastomera i termoplastičnih poliuretana, sa i bez kompatibilizatora. Istražit će se mješavine polimera i BIT priređene s olefinskim P, njihovim mješavinama, otpadom istih, i s termoplastičnim blok kopolimerima kao modifikatorima. Cilj je utvrditi utjecaj kompozicije PM i PMB, strukture blok kopolimera i ostalih TPE kao kompatibilizatora i polimernih modifikatora BIT, te uvjeta procesiranja na morfološku strukturu mješavina, veličinu i oblik dispergirane faze, fizikalne i/ili kemijske interakcije faza i raspodjelu pojedinih blokova kompatibilizatora i modifikatora na površini faza i domena u matrici. Daljnji cilj je ustanoviti utjecaj modificiranih površina i morfološke strukture PM i PMB na reološka svojstva u procesiranju i uporabi, stabilnost na konstantno opterećenje i opterećenje u ciklusima, te provjera morfološke analize i reoloških svojstava fraktalnom analizom. Stabilnost na djelovanje faktora razgradnje i otpornost na trošenje. Recikliranje otpada. Očekivani rezultati su nove znanstvene spoznaje odnosa morfološke strukture i njene ovisnosti o kompoziciji, vrsti i udjelu faza, te utjecaja morfološke strukture na svojstva sustava. Rezultati će se provjeravati kroz znanstvene spoznaje, publikacije, edukacijom kadra, te primjenom u gospodarstvu. Važnost istraživanja je mogućnost kreiranja strukture, inženjerskih svojstava PM i PMB za pojedine zahtjeve primjene, što je doprinos razvoju znanosti, nastave i gospodarstva.

Projekt 125-1252971-2868

Vibracijska dinamika i struktura multifunkcionalnih polimernih sustava

Voditelj: Vesna Volovšek

Sažetak: Razvoj novih polimernih materijala temelji se na ugradnji nanočestica u polimernu matricu. Dodavanje anorganskih komponenata dovodi do poboljšanja različitih fizičkih i mehaničkih svojstava kompozita. Ta su poboljšanja rezultat kompleksnog međudjelovanja polimera, punila i međusloja. Na funkcionalnost i intrinzička svojstva tako dobivenih materijala značajno utječe dobro prostorno raspršenje nanočestica u matrici, te vrsta i karakter veza u međusloju polimer-nanopunilo. U našim istraživanjima određivali bismo strukturu i dinamiku multifunkcionalnih polimernih materijala, kombinirajući eksperimentalni i teorijski pristup. Eksperimentalnu osnovu činile bi vibracijske spektroskopije, ramanova i infracrvena. Te su metode važne za analizu polimernih nanokompozita, jer se pomoću njih dobivaju informacije na molekularnoj razini. Vibracijske spektre analizirali bismo računanjem dinamike slobodne makromolekule i njenih podjedinica. Valentno polje, plohe potencijalne energije, geometriju različitih konformacija molekula, vibracijske frekvencije, intenzitete infracrvenih vibracijskih vrpca kao i ramanske aktivnosti računali bi DFT (density functional theory) metodom, korištenjem B3LYP funkcionala i 6-31G(d,p) baznim skupom funkcija. Ta se metoda pokazala uspješnom u analizi organosilicijskih spojeva. Račun bi nam omogućio pouzdanu asignaciju karakterističnih vrpca pojedinih atomskih grupa i karakterizaciju interakcija u međupovršini nanočestica-polimer. Budući da se fizikalna svojstva materijala mijenjaju pod utjecajem vanjskih parametara (temperature, tlaka, naprezanja, starenja, udjela aditiva), poznavanje karakterističnih vrpca i praćenje njihovih promjena u vibracijskim spektrima omogućilo bi nam razumijevanje opaženog ponašanja kompleksnih kompozitnih i nanokompozitnih materijala na molekularnoj razini. Posebna bi se pažnja usmjerila i na istraživanje niskofrekventnog dijela vibracijskog spektra iz kojeg se mogu dobiti informacije o djelomičnom uređenju takvih složenih sustava (Boseova vrpca). Mjerenjem dikroičnog omjera iz polariziranih infracrvenih spektara, određivala bi se orijentacija pojedinih segmenata u tankim polimernim filmovima podvrgnutim jednoosnom naprezanju. Dobiveni rezultati uspoređivali bi se s mjerenjima mehaničkih svojstava.

OPIS PROGRAMA

Voda je jedan od najvažnijih prirodnih resursa i bez nje bi život na zemlji bio nemoguć. Jedan od prioriteta zaštite okoliša upravo je očuvanje čiste vode. Hipoteza: Istraživanjem i razvojem novih te poboljšanjem postojećih tehnologija obrade vode moguće je utjecati na očuvanje, pa čak i unapređenje kvalitete vode. Glavni cilj programa je razvoj novih, učinkovitih tehnologija za obradu voda čija će primjena kao segmenta upravljanja kvalitetom voda doprinijeti očuvanju okoliša kroz koncept održivog razvoja. Početni cilj je istražiti i definirati sve aspekte bitne za odnos voda-okoliš kroz koordinirani rad interdisciplinarnog tima. Slijede pojedinačne potvrde hipoteze kroz istraživanja procesa obrade pitkih, industrijskih i balastnih voda. Ocjenjivat će se učinkovitost primijenjenih tehnologija i dodatni utjecaj na okoliš svake od njih u specifičnim uvjetima. Očekuje se eksperimentalno potvrđivanje hipoteze i razvoj znanja koja će definirati uvjete i načine primjene tehnologija za učinkovitu obradu specifičnih tipova voda u RH. Osim djelotvornosti u smislu uklanjanja pojedinih zagađivala, razmatrat će se i ekonomski aspekti predloženih tehnologija te njihov utjecaj na okoliš kroz stalnu kontrolu ekoloških pokazatelja. Razvojem naprednih oksidacijskih tehnologija kao destruktivnih metoda razgradnje toksičnih i teško biorazgradljivih tvari i inaktivacije živih organizama te eksperimentalnom provjerom u laboratorijskom mjerilu i pilot uređaju ponudit će se konkretna rješenja za: smanjenje sadržaja organskih tvari, povećanje biorazgradljivosti i izdvajanje arsena iz pitkih voda; razgradnju herbicida, tenzida, bojila i fenola iz industrijskih voda; uklanjanje alohtonih organizama iz balastnih voda u kombinaciji s mehaničkim metodama separacije. Integriranjem metode ionske izmjene u sustave proizvodnje umjetnih gnojiva, bojila i galvanizacije omogućit će se recirkulacija vode i ponovna upotreba sirovina iz koncentriranih eluata. Ciljevi programa mogu se ostvariti isključivo interdisciplinarnom suradnjom znanstvenika s područja kemije, biologije, kemijskog inženjerstva, inženjerstva okoliša i strojarstva okupljenih u četiri projekta (11 laboratorija). Zbog širine značaja programa neophodna je i međuregionalna suradnja dvaju fakulteta Sveučilišta u Zagrebu i jednog odjela Sveučilišta u Dubrovniku. Rezultati istraživanja doprinijet će očuvanju okoliša i vodenih resursa što, s obzirom na turističku orijentaciju RH i važnost Jadranskog akvatorija, daje programu specifičan značaj.

>>

PROJEKTI

Aktivni projekti na programu Razvoj novih tehnologija za obradu voda

- 125-1253092-3004 Procesi ionske izmjene u sustavu kvalitete industrijskih voda
Voditelj: Štefica Cerjan-Stefanović
Znanstveno područje / Polje: Tehničke znanosti / Kemijsko inženjerstvo
Naslovna institucija: Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije
- 125-1253092-1981 Obrada otpadnih voda naprednim oksidacijskim tehnologijama
Voditelj: Natalija Koprivanac
Znanstveno područje / Polje: Tehničke znanosti / Kemijsko inženjerstvo
Naslovna institucija: Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije
- 120-1253092-3021 Ekološka prihvatljivost i učinkovitost suvremenih postupaka
u obradi voda
Voditelj: Nikola Ružinski
Znanstveno područje / Polje: Tehničke znanosti /
Druge temeljne tehničke znanosti
Naslovna institucija: Fakultet strojarstva i brodogradnje, Zagreb

Projekt 125-1253092-3004

Procesi ionske izmjene u sustavu kvalitete industrijskih voda

Voditelj: Štefica Cerjan-Stefanović

Sažetak: U gospodarenju vodama, vodu treba kao sirovinu optimalno iskoristi, a to je moguće separacijom zagađivala pomoću ionskih izmjenjivača i drugih modernih i klasičnih procesa pročišćavanja. Izborom selektivnih ionskih izmjenjivača vezanih uz procese, voda se može pročititi do 70 %. Pročišćena voda može se vraćati u proizvodni proces ili ispustiti u prirodni recipijent. Koncentrirane otopine, dobivene regeneracijom ionskih izmjenjivača (ioni cinka, arsena, kroma, fosfora i fluora) ili koncentrata, vraćaju se kao sirovina u proizvodni proces. Redoslijed vezanja ionskih izmjenjivača može se samo eksperimentalno odrediti, jer mehanizmi separacije ovise o nizu karakteristika voda određenog proizvodnog procesa. Vode u proizvodnji gnojiva, počinčavanju i bojanju imaju vrlo nejednolik sastav tijekom proizvodnje, što dovodi do radnih šokova u ionskoj izmjenjivačkoj koloni. Proučit će se segment voda na ulazu u sistem ionske izmjene, tijekom izmjene i eluati. Tako bi se rasteretio ionski izmjenjivač, koji dolazi u kontakt s agresivnim influentom. Paralelno sa sintetskim smolama (HP-555, HP-441, Amberlit IRA 93 SP, Lewatit S 4426, Amberlit Cg-400 i Dowex 1x8), ispitat će se kapaciteti izmjene, brzine vezanja i krivulje proboja zeolita. Kromatografske analize provodile bi se na ionskom kromatografskom sustavu DX600, s elektrokemijskim detektorom ED50 i kolonom AS19. Kolona AS19 izabrana je jer je specijalno dizajnirana za analizu oksihalida i aniona u vodi za piće, podzemnim, morskim i otpadnim vodama, te drugim sličnim uzorcima. Mobilna faza bila bi otopina KOH. Testiranje primjenjivosti izabranog modela u ionskoj kromatografskoj analizi provodilo bi se na dvije skupine aniona. Prvu skupinu sačinjavali bi fluorid, klorit, klorid, klorat, nitrat i sulfat ion, a drugu formijat, bromat, nitrit, bromid, karbonat i fosfat ion. Ovim znanstvenim pristupom će se, neuronskim mrežama i genetičkim alogitmima, modelirati selektivnost, time će se kontrolirati i upravljati pilot postrojenjem. Takvim postupkom voda u industriji ne bi se koristila samo jedanput i ne bi se stvarao opasan otpad (talozi na bazi cinka, kroma, arsena, fluora i fosfora). Princip ponovnog korištenja voda u galvanizaciji, industriji gnojiva i korištenju organskih bojila, postat će model obrada voda i drugih industrijskih grana.

Projekt 125-1253092-1981

Obrada otpadnih voda naprednim oksidacijskim tehnologijama

Voditelj: Natalija Koprivanac

Sažetak: Voda je bitan prirodni resurs za održiv ekosustav, ljudski život i gospodarski razvoj. Očuvanje čiste vode zahtijeva smanjenje utroška vode, smanjenje količine otpadnih voda, te smanjenje opterećenja otpadnih voda. Upravljanje tehnološkim otpadnim vodama podrazumijeva multidisciplinarni pristup i usuglašavanje sa sve strožom zakonskom regulativom. Organska zagađivala u otpadnim vodama predstavljaju poseban problem zbog njihove toksičnosti, bioakumulacije, te slabe biorazgradljivosti. Cilj ovog projekta je istraživanje potencijala koje nude napredne oksidacijske tehnologije (AOT) kao destruktivne metode za obradu otpadnih voda opterećenih različitim postojećim organskim zagađivalima. Za razliku od klasičnih, ove se tehnologije ubrajaju u grupu nisko i bezotpadnih tehnologija obrade otpadnih voda, pa se njihovom primjenom smanjuje potreba za sekundarnom obradom. Istraživanje će biti provedeno na modelnim otpadnim vodama koje sadržavaju odabrana organska bojila, herbicide, tenzide te intermedijare organske kemijske industrije. Studirat će se primjenljivost naprednih oksidacijskih procesa (AOP): kemijskih, fotokemijskih, katalitičkih, fotokatalitičkih i procesa s visokonaponskim električkim pražnjenjem. Ispitat će se utjecaj čvrstih čestica, različitih tipova zeolita, na sve primijenjene procese. Očekuje se visoka djelotvornost procesa u smislu razgradnje organskih zagađivala i/ili povećanja njihove biorazgradljivosti. Učinkovitost AOP-a bit će procijenjena na temelju ekoloških pokazatelja prije i poslije obrade otpadne vode, te količine i tipa nastalih razgradnih produkata. Na temelju dobivenih rezultata optimiranja

svakog pojedinog procesa obzirom na njegove procesne parametre i tip zagađivala, bit će odabran najprihvatljiviji proces prema kriteriju učinkovitosti. Istraživanje mehanizma i kinetike procesa korištenjem modernih analitičkih metoda bit će osnova za razvijanje matematičkih modela koji će pružiti mogućnost predviđanja ponašanja ispitivanih sustava u realnom mjerilu. Implementacija naprednih oksidacijskih tehnologija za rješavanje problematike otpadnih voda opterećenih organskim zagađivalima u skladu je s načelima održivog razvitka, te dugoročnim i kratkoročnim strateškim pravcima istraživanja u Republici Hrvatskoj. Rezultati istraživanja u okviru ovog projekta mogu biti osnova idejnog rješenja postrojenja za obradu otpadnih voda koje sadržavaju različita organska zagađivala kemijske i srodnih industrija.

OPIS PROGRAMA

Znanost o materijalima i inženjerstvo materijala se smatraju temeljnom vrstom znanosti jer se rezultati istraživanja materijala prenose u druge grane znanosti i tehnike (elektroniku, kemijsku tehnologiju, strojarstvo, brodogradnju, graditeljstvo, medicinu i dr.) te dovode do razvoja novih proizvoda boljih svojstava. Konačni izvori sirovina za dobivanje materijala i sve veće zagađivanje okoliša postavljaju pred znanstvenike nove zahtjeve za razvoj i primjenu trajnijih materijala. Inženjerstvo površina, kao novija znanstvena i stručna disciplina, intenzivno se razvija zbog velikog utjecaja na trajnost, pouzdanost i ekonomičnost konstrukcijskih elemenata u mnogim tehničkim disciplinama. Razvijaju se novi postupci modificiranja i prevlačenja kojima se postižu izvrsna tribološka i kemijska svojstva metalnih površina. Program Modificiranje i oplemenjivanje metalnih površina je sljednik istoimenog kolaborativnog projekta (KP 0125007) prihvaćenog od MZOŠ 2003., u kojem su surađivali istraživači koji djeluju na tri projekta unutar Sveučilišta u Zagrebu (dva projekta na Fakultetu kemijskog inženjerstva i tehnologije kao i jedan projekt na Fakultetu strojarstva i brodogradnje). Potaknuti pozitivnim rezultatima ove suradnje u okviru kolaborativnog projekta, suradnici su odlučili nastaviti tu suradnju u okviru novog programa. U ovoj suradnji na programu pridružili su se i suradnici projekta sa Kemijsko-tehnološkog fakulteta Sveučilišta u Splitu, čija su znanstvena istraživanja i po tematici, kao i po metodama vrlo bliska istraživanjima koja se provode unutar programa na FKIT-u. Zajednički cilj istraživanja na svim ovim projektima je: modificiranjem površine dobiti metal otporniji prema uvjetima u kojima se nalazi. Rezultati ovih ispitivanja će pokazati u kolikoj je mjeri postignuta djelotvorna zaštita važnih konstrukcijskih metala (čelik, bakar, aluminij i njihove slitine) u uvjetima primjene. Važno je napomenuti da su sva istraživanja osnovana na ekološki prihvatljivim spojevima i tehnikama. Ispitivanja će biti provedena najsuvremenijim elektrokemijskim metodama (polarizacijske tehnike, elektrokemijska impedancijska spektroskopija), kvarc-kristalnoj nano vagi kao i pomoću spektroskopskih metoda (SEM, EDS, AFM i Raman). Važnost predloženog istraživanja je u dobivanju trajnijeg i pouzdanijeg materijala, što ima posljedice u ekonomičnosti, u štednji izvora sirovina i energije, zaštiti okoliša kao i u očuvanju kulturne baštine.



PROJEKTI

Aktivni projekti na programu Modificiranje i oplemenjivanje metalnih površina

- 125-1252973-2572 Novi netoksični inhibitori korozije metala
Voditelj: Ema Stupnišek Lisac
Znanstveno područje / Polje: Tehničke znanosti / Kemijsko inženjerstvo
Naslovna institucija: Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije
- 125-1252973-2576 Temeljna i primijenjena istraživanja vodljivih polimera
Voditelj: Zoran Mandić
Znanstveno područje / Polje: Tehničke znanosti / Kemijsko inženjerstvo
Naslovna institucija: Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije
- 011-1252973-2243 Elektrokemijski procesi na granici faza i fizikalna svojstva površina-ELGRAFAIII
Voditelj: Jagoda Radošević
Znanstveno područje / Polje: Tehničke znanosti / Kemijsko inženjerstvo
Naslovna institucija: Kemijsko-tehnološki fakultet, Split
- 120-1252973-1814 Difuzijsko modificiranje čelika karbidnim slojevima
Voditelj: Mladen Stupnišek
Znanstveno područje / Polje: Tehničke znanosti / Strojarsvo
Naslovna institucija: Fakultet strojarstva i brodogradnje, Zagreb

Voditelj: Ema Stupnišek Lisac

Sažetak: Korozija je proces nenamjernog razaranja konstrukcijskih materijala (uzrokovan fizikalnim, kemijskim i biološkim čimbenicima), koji je odgovoran za gubitak 1 % nacionalnog bruto proizvoda pojedinačne nacionalne ekonomije. Prema tome, od velikog značaja je razvoj metoda i tehnika za smanjenje tog procesa. Među ostalim tehnikama zaštite od korozije, primjena inhibitora korozije zauzima posebno mjesto i po specifičnosti zaštite kao i po raširenosti primjene. (1) Cilj ovog projekta je razvoj novih, djelotvornih i ekološki prihvatljivih inhibitora korozije. Dosadašnja istraživanja utjecaja sastava i strukture molekule na zaštitna svojstva heterocikličkog organskog spoja pokazala su da je moguće dizajnirati molekulu organskog spoja dobrih inhibitorских karakteristika. Sintetizirani su novi derivati imidazola s fenilnom skupinom koji su pokazali znatno bolja inhibitorска svojstva. Postupak sinteze ovih spojeva, kao i njihova inhibitorска svojstva su u postupku dobivanja patentnih prava /DZIV br. 757(P-442)/. Rezultati naših istraživanja provedenih na Projektu 0125012 pokazali su da su derivati imidazola dobri inhibitori atmosferske korozije bakra kao i korozije bakra u otopinama anorganskih kiselina i u morskoj vodi. Na osnovi dosadašnjih iskustava nastavit će se modificiranje molekule imidazola uvođenjem novih supstituenata i ispitivanje djelotvornosti novih inhibitora korozije bakra i drugih metala u raznim agresivnim sredinama. (2) Preliminarna ispitivanja djelotvornosti ovih inhibitora na zaštitu patine na bronci koja su provedena u okviru međunarodnog projekta ECO-NET (suradnja istraživača iz Francuske, Hrvatske i Rumunjske) ukazala su na mogućnost djelotvorne zaštite patiniranih brončanih skulptura izloženih uvjetima zagađene urbane atmosfere (kisele kiše). Ispitivanja će biti provedena na bronci sastava sličnog arheološkoj bronci, koja je patinirana umjetnom patinom dobivenom elektrokemijskim postupkom, a zatim na uzorcima arheološke bronce. Ispitivanja će biti provedena najsuvremenijim elektrokemijskim metodama (polarizacijske tehnike, elektrokemijska impedancijska spektroskopija), kvarc-kristalna nano vaga kao i pomoću spektroskopskih metoda (SEM, XPS, AFM i Raman). Značaj predloženog istraživanja je višestruk: a) zaštita bakra u uvjetima atmosferske korozije u elektroničkoj industriji, b) smanjenje otapanja metala u industrijskim procesima kiselinskog dekapiranja, c) zaštita bakra od korozije u morskoj vodi, d) zaštita kulturne baštine.

Voditelj: Zoran Mandić

Sažetak: Električki vodljivi polimeri pripadaju vrlo važnoj skupini makromolekularnih materijala sa stajališta kemije, fizike i inženjerstva materijala. Zbog raznovrsnosti svojih struktura i mnogobrojnosti fizikalno-kemijskih svojstava, ovi materijali posjeduju velike mogućnosti primjene. Svrha ovog projekta je određivanje odnosa između strukture vodljivih polimera i njihovih svojstava s ciljem njihove primjene u zaštiti neplemenitih materijala od korozije, elektrokatalizi i u kontroliranom otpuštanju lijekova. Najveće težište posvetit će se morfologiji priređenih slojeva, površinskoj gustoći i raspoloživosti aktivnih centara, poroznosti i kompaktnosti slojeva, otporu prijelazu naboja, kapacitetima, brzini prijelaza iz vodljivog u nevodljivo stanje i obrnuto. Posebna pažnja posvetit će se polianilinu i njegovim derivatima, zbog njihove velike kemijske stabilnosti te velikog broja oksidacijskih i kiselinsko-baznih stanja. Vodljivi će se polimeri sintetizirati elektrokemijskim putem, direktno na čvrstoj podlozi. Za određivanje strukture i svojstava vodljivih polimera koristit će se elektrokemijske, spektroskopske i mikroskopske tehnike. Od rezultata dobivenim na ovom projektu očekuje se proširenje temeljnih znanja kemije, fizike i inženjerstva ove vrste materijala i istovremeno unaprjeđenje starih i otvaranje novih primjena vodljivih polimera u znanosti, tehnologiji i medicini.

OPIS PROGRAMA

Na području pročišćavanja voda postoji još niz neistraženih mogućnosti razvoja i primjene suvremenih membranskih tehnologija, kemijskih i/ili bioloških postupaka tretmana voda, te zahvata radi stabilizacije vode u velikim vodoopskrbnim sustavima. Nije još u adekvatnoj mjeri riješen problem obrade i odlaganja nusprodukata pročišćavanja voda, kao što su otpadni mulj i retentat, koji sadrže arsen, farmaceutike i druge otrovne supstancije. Nedostaju osjetljivi analitički postupci kao pouzdana potpora postupcima pročišćavanja voda i ocjeni kakvoće okoliša. Rješavanje istaknutih problema predviđa se u okviru tri projekta: Pročišćavanje i stabilizacija vode u velikim sustavima vodoopskrbe, voditelj Laszlo Sipos; Membranski i adsorpcijski postupci uklanjanja organskih tvari pri obradi voda, voditelj Krešimir Košutić; i Razvoj naprednih analitičkih metoda za određivanje farmaceutika u okolišu, voditelj Sandra Babić. Primjenom laboratorijskih pokusa i pilot postrojenja planirana istraživanja usmjerit će se razvoju i primjeni membranskih tehnologija za pripremu vode za piće u završnoj fazi obrade te razvoju učinkovitih kemijskih i/ili bioloških postupaka koji prethode membranskoj filtraciji. Razvijat će se postupci uklanjanja organskih tvari, željeza, mangana i amonijaka, a posebna će se pozornost posvetiti uklanjanju arsena do koncentracija <10 mg/L. Predviđa se razvoj novih postupaka korekcije karbonatne stabilnosti vode za piće membranskim postupcima i elektrodijalizom. Nadalje, radit će se na razvoju novih tipova senzora i autonomnih mjernih postaja za praćenje kakvoće vode tijekom zadržavanja u vodoopskrbnoj mreži. Radit će se na karakterizaciji i obradi otpadnih tvari iz postrojenja za pripremu vode za piće sa sadržajem arsena, te otpadnih tvari u retentatu kao nusproduktu primjene membranskih tehnologija (RO, NF i UF). Razvijat će se analitički postupci određivanja tragova organskih spojeva, prvenstveno farmaceutika u okolišu, te postupci određivanja elemenata metodom ICP-MS. Od planiranih istraživanja očekuju se prijedlozi konkretnih rješenja za obradu voda i mulja za potrebe velikih vodoopskrbnih sustava iz podzemnih voda istočne Slavonije i krških izvorišta priobalnog područja Hrvatske i jadranskih otoka, te razvoj više novih naprednih metoda analize voda, otpadnih tvari i općenito uzoraka iz okoliša.

>>

PROJEKTI

Aktivni projekti na programu Istraživanje i razvoj postupaka analize i pročišćavanja voda

- 125-1253008-1350 Razvoj naprednih analitičkih metoda za određivanje farmaceutika u okolišu
Voditelj: Sandra Babič
Znanstveno područje / Polje: Prirodne znanosti / Kemija
- 125-1253008-3009 Membranski i adsorpcijski postupci otklanjanja organskih tvari pri obradbi voda
Voditelj: Krešimir Košutić
Znanstveno područje / Polje: Tehničke znanosti / Kemijsko inženjerstvo
- 125-1253008-2571 Pročišćavanje i stabilizacija vode u velikim vodoopskrbnim sustavima
Voditelj: Laszlo Sipos
Znanstveno područje / Polje: Tehničke znanosti / Kemijsko inženjerstvo

Napomena:

Svi projekti na programu izvode se na Fakultetu kemijskog inženjerstva i tehnologije.

Projekt 125-1253008-1350

Razvoj naprednih analitičkih metoda za određivanje farmaceutika u okolišu

Voditelj: Sandra Babić

Sažetak: Humani i veterinarski farmaceutici se kontinuirano unose u okoliš kao rezultat proizvodnog procesa, odlaganja neupotrijebljenih farmaceutskih proizvoda ili kao izlučevine. Tek nedavno su farmaceutici prepoznati kao zagađivala okoliša, što zahtijeva daljnja istraživanja. Njihova karakteristika je da ne moraju biti postojani u okolišu da bi uzrokovali negativne učinke, jer se kontinuirano unose u okoliš. Štoviše, fizikalno-kemijska svojstva (dobra topljivost u vodi i slaba razgradivost) nekih farmaceutika omogućuje njihov prolaz kroz sve prirodne filtere i postrojenja za obradu voda te na taj način ugrožavaju sustav opskrbe pitkom vodom. Nepotpuno uklanjanje u postrojenjima za obradu otpadnih voda navodi se kao glavni put njihova ispuštanja u okoliš. Činjenica da farmaceutici nisu na listi zagađivala rezultirala je slabijim istraživanjima o njihovoj prisutnosti u okolišu. Stoga se analitičke metode njihova određivanja u složenim matricama poput otpadnih voda i posebice sedimenta tek odnedavno razvijaju. Cilj projekta je poboljšati postojeće analitičke metode i razviti nove osjetljivije i učinkovitije analitičke protokole određivanja farmaceutika u otpadnim vodama i sedimentu. Naglasak će biti na razvoju robustnih, kromatografskih metoda koje omogućuju istovremeno određivanje velikog broja farmaceutika iz različitih strukturnih skupina uz upotrebu različitih detektora (fluorescentni, DAD i maseni spektrometar), nakon ekstrakcije analita čvrstom fazom za uzorke vode te ultrazvučne ili mikrovalne ekstrakcije za sediment. Ovakav pristup omogućit će izolaciju analita iz kompleksne matrice, poboljšati analitičke osobine metode te smanjiti zagađenje okoliša zbog uporabe daleko manjeg volumena štetnih i agresivnih otapala. Rezultati će se provjeravati uobičajenim postupcima procjene kvalitete mjernog sustava, a prvenstveno validacijom izvedbenih značajki metode. Točnost metode određivat će se usporedbom s referencijskim materijalima i sintetičkim uzorcima. Osim ove unutarnje procjene rezultata, svoje ćemo rezultate provjeravati objavljivanjem u međunarodno priznatim časopisima i sudjelovanjima na znanstvenim skupovima. Značenje istraživanja je u primjeni optimiranih i validiranih metoda na određivanje farmaceutika u otpadnim vodama i sedimentu. Dobivene informacije su neophodne za određivanje prisutnosti i procjenu rizika te optimizaciju rada postrojenja za obradu otpadnih voda, što će spriječiti ispuštanja neželjenih zagađivala u okoliš.

Projekt 125-1253008-3009

Membranski i adsorpcijski postupci otklanjanja organskih tvari pri obradbi voda

Voditelj: Krešimir Košutić

Sažetak: Intenzivno istraživanje, razvoj i primjena membranskih tehnologija u posljednjih desetak godina svrstava ih, radi visoke učinkovitosti te ekološke prihvatljivosti, u najsuvremenije tehnologije obradbe voda 21. stoljeća. Predviđanja globalnog membranskog tržišta očekuju u sljedećih 5 godina rast membranske industrije od preko 54 %. Ove se tehnologije primjenjuju već neko vrijeme i u nas, za desalinaciju slanih voda na Lastovu i Mljetu (uskoro i na Dugom Otoku, Susku i dr.), pri separaciji kapljevina u industriji, a u pripremi je i čišćenje pitkih voda u kontinentalnom dijelu zemlje. Važnost membranskih procesa raste zbog učinkovitog uklanjanja organskih tvari, posebno novih organskih onečišćenja, poput pesticida, dezinfekcijskih nusprodukata, antibiotika i sl., iz prirodnih i otpadnih voda. Primjena membranskih postupaka je zato veoma važna u sveukupnoj skrbi o vodenim resursima. Glavni cilj istraživanja bit će bolje upoznavanje mehanizma separacije (zadržavanja) raznih organskih onečišćenja na izabranim reverzno osmotskim i nanofiltracijskim membranama različite poroznosti, i to temeljeno na studiju međudjelovanja membrane, otopina i radnih uvjeta. Ispitivanje morfoloških karakteristika, prvenstveno mjerenje poroznosti aktivnog sloja membrana, omogućit će procjenu separacijskog ponašanja membrane i karakterizaciju novih, energijski štedljivih RO/NF membrana. Faznom inverzijom sintetizirat će se i karakterizirati RO membrane na bazi celuloznih derivata. Ispitat će se učinkovitost membrana pri uklanjanju tipičnih novih organskih onečišćenja iz modelnih

vodenih otopina, uz optimiranje radnih uvjeta. Iz dobivenih rezultata definirat će se mehanizmi separacije u ispitivanim sustavima membrana-otopina. Na temelju postavljenih separacijskih mehanizama provest će se RO/NF obradba realnih prirodnih i industrijskih procesnih i otpadnih voda. Ispitivat će se također kemijska i strukturna obilježja prirodnih i sintetičkih alumosilikata namijenjenih obradbi specifičnih industrijskih otpadnih voda. Hibridnim procesima (uz membranske postupke i adsorpcijom) obradit će se vode papirne i grafičke industrije opterećene bojama i otapalima. Istražit će se mogućnost kombiniranja membranskih postupaka, mikro- i ultrafiltracije, kao predobradbe za reverznu osmozu.

Projekt 125-1253008-2571

Pročišćavanje i stabilizacija vode u velikim vodoopskrbnim sustavima

Voditelj: Laszlo Sipos

Sažetak: Na području pročišćavanja voda postoji još niz neistraženih mogućnosti razvoja i primjene suvremenih membranskih tehnologija, kemijskih i/ili bioloških postupaka tretmana voda, zahvata radi stabilizacije vode u velikim vodoopskrbnim sustavima, karakterizaciji i obradi otpadnih tvari kao nusprodukta pročišćavanja, te razvoja pratećih analitičkih metoda i tehnika. Primjenom laboratorijskih pokusa i pilot postrojenja, planirana istraživanja usmjerit će se razvoju i primjeni učinkovitih kemijskih i/ili bioloških postupaka koji prethode membranskoj filtraciji. Razvijat će se postupci uklanjanja organskih tvari, željeza, mangana i amonijaka, a posebna će se pozornost posvetiti uklanjanju arsena do koncentracija <10 mg/L. Predviđa se razvoj novih postupaka korekcije karbonatne stabilnosti vode za piće. Nadalje, radit će se na razvoju novih tipova senzora i autonomnih mjernih postaja za praćenje kakvoće vode tijekom zadržavanja u vodoopskrbnoj mreži. Planira se rad na karakterizaciji i obradi otpadnih tvari iz postrojenja za pripremu vode za piće sa sadržajem arsena, te otpadnih tvari u retentatu kao nusproduktu primjene membranskih tehnologija (RO, NF i UF). Razvijat će se analitički postupci određivanja elemenata metodom ICP-MS. Od planiranih istraživanja očekuju se prijedlozi konkretnih rješenja za obradu voda i mulja za potrebe velikih vodoopskrbnih sustava iz podzemnih voda istočne Slavonije i krških izvorišta priobalnog područja Hrvatske.

OPIS PROGRAMA

Nastanak i razvoj tumora posljedica je genetskih i epigenetskih čimbenika, među koje spadaju strukturne i funkcionalne promjene gena. Nove spoznaje o molekulske osnovama mijenjaju pristup u ranom otkrivanju tumora, prepoznavanju novih biljega i omogućuju molekularno usmjereno liječenje. Ipak, ključne molekularno-genetičke promjene još uvijek nisu poznate, iako se korištenjem novih metoda (analize cjelokupnog transkriptoma i proteoma) ubrzano otkrivaju nova molekularna zbivanja u procesu zloćudne preobrazbe. Očito je da ključni molekularni mehanizmi u nastanku raka uglavnom još nisu otkriveni te da su znatno brojniji nego što se to smatralo na temelju dosadašnjeg, redukcionističkog pristupa. Svrha programa je objedinjenje znanstvenika i stručnjaka, opreme i najsvremenije metodologije kako bi se: (1) objasnila molekularno-genetička osnova nastanka nekih zloćudnih tumora; (2) otkrile nove mogućnosti ranog prepoznavanja tumora; (3) otkrili novi, učinkoviti lijekovi. Za izvođenje programa koristit će se najmodernije znanstvene metode, između ostalih i metode DNA-čipova, proteomike i rekombinantne tehnologije DNA. Rezultati ovih istraživanja trebali bi odgovoriti na pitanja vezana uz molekularne čimbenike/mehanizme ključne za nastanak zloćudne preobrazbe u odabranim modelima tumora. Analiza sveukupnog transkriptomskog i proteomskog profila trebala bi omogućiti otkrivanje novih meta u molekularno usmjerenom liječenju. Dobiveni rezultati omogućit će i znatan napredak u istraživanjima drugih bolesti, posredno, razvojem specifičnih, ciljanih metoda koje bi trebale zaživjeti i u kliničkoj praksi, kao što je bio slučaj i s prethodnim kolaborativnim projektom Molekularna onkologija.

>>

PROJEKTI

Aktivni projekti Fakulteta kemijskog inženjerstva i tehnologije na programu Integrativna genomika i proteomika u istraživanju raka

- 125-0982464-1356 Novi heterocikli kao antitumorski i antivirusni ("pametni") lijekovi
Voditelj: Grace Karminski-Zamola
- 125-0982464-2922 Razvoj novih prolijekova i lijekova protiv virusa i raka
Voditelj: Mladen Mintas
- 125-0982464-2925 Razvoj i primjena novih molekula u pozitronemisijjskoj tomografiji (PET)
Voditelj: Silvana Raić-Malić

Napomena:

Navedeni projekti pripadaju području Prirodnih znanosti, polje Kemija.

Projekt 125-0982464-1356

Novi heterocikli kao antitumorski i antivirusni ("pametni") lijekovi

Voditelj: Grace Karminski-Zamola

Sažetak: Sinteza novih, ciljano odabranih, heterocikličkih sustava iz reda: benzimidazola, benzotiazola, benzimidazokinolina, benzimidazokinazolina, oksa (tia)-diazaciklopenta [c]fluorena, benzazola, pirimidobenzimidazola, oksazolo- i tiazolopirimidinijevih soli te naftofuranskih spojeva, svih s odgovarajućim farmakofornim skupinama (prvenstveno cijano skupine, te protonirane amidino i amino grupe) kao potencijalnih antitumorskih i antivirusnih ("pametnih") lijekova. Istraživanja bi obuhvaćala: (1) razvoj sintetskih i razvoj fotosintetskih metoda za pripremu spomenutih sustava, naročito fotokemijskih reakcija u vodi (tzv. *green photochemistry*); (2) istraživanje i razvoj ostalih sintetskih metoda, naročito sintetskih metoda potpomognutih mikrovalovima; (3) uvođenje i korištenje molekuskog modeliranja i QSAR metoda prilikom sinteze; (4) ispitivanje vezivanja priređenih kondenziranih heterocikličkih sustava na DNA korištenjem spektroskopskih metoda (fluorescencija, UV spektroskopija, NMR spektroskopija, cirkularni dikroizam CD, tekućinski dikroizam, elektroforeza te primjena rentgenske strukturne analize); (5) kompleksiranje priređenih organskih spojeva s metalima najčešće prisutnim u ljudskom organizmu koji bi tako potpomogli apoptozu; (6) razvoj supstancija za tzv. fotodinamičku terapiju raka, što podrazumijeva uvođenje neaktivne (i netoksične) tvari *in situ* tumorskog oboljenja te pretvorbu te tvari u antitumorski aktivnu, korištenjem manje agresivnog elektronskog zračenja (UV, vidljivo). Pretpostavlja se da bi sintetizirani spojevi mogli djelovati na tumorske stanice kao interkalatori (*groove binders*), supresori enzima topoizomera I i II, tirozinkinaza ili inhibitori DDP-a u antitumorskoj terapiji. Proučavao bi se njihov učinak na ekspresiju gena. Svi rezultati antiproliferativnog učinka bi se bioinformatički obradili. Koristeći sve raspoložive metode i znanja, približili bi se mogućnosti sinteze tzv. "pametnih" lijekova, koji efikasno suzbijaju replikaciju tumorskih stanica, a manje zdravih stanica.

Projekt 125-0982464-2922

Razvoj novih prolijekova i lijekova protiv virusa i raka

Voditelj: Mladen Mintas

Sažetak: Široko rasprostranjene zaraze uzrokovane virusima i rak zdravstveni su problem svjetskih razmjera. Osnovni problemi u antivirusnoj i protutumorskoj kemoterapiji su rezistentnost na lijekove i njihova štetna djelovanja na normalno tkivo. Glavni cilj predloženih istraživanja je sintetizirati nove spojeve koji bi se mogli koristiti kao selektivni i djelotvorni spojevi na viruse i zloćudne tumore porijeklom iz čovjeka. Radi ostvarenja tog cilja provodit će se sljedeća istraživanja: (1) sintetizirat će se novi spojevi: A. nezasićeni aciklički analozi nukleozida; B. biciklički pirimidinski derivati L-askorbinske kiseline; C. purinski i pirimidinski derivati ciklopropanskih aminokiselina; D. aminokiselinski derivati hidroksiuree i hidantoina; (2) ispitat će se djelovanje *in vitro* novih spojeva na patogene viruse, posebice humani imunodeficijenti virus (HIV), humani papiloma virus (HPV), herpes simpleks virus tipa 1 i 2 (HSV-1 i -2), i varicella zoster virus (VZV), a također i stanične linije zloćudnih tumora porijeklom iz čovjeka poput raka gušterače (MiaPaCa-2) i raka grla maternice (HeLa); (3) spojevi s najjačim djelovanjima protiv virusa HSV-1 i -2 i VZV ispitati će se *in vitro* na humanim keratinocitima; (4) predvodni spojevi s inhibitornim učincima (EC50 manjim od 0,1 ug/mL) odabrat će se za ispitivanja *in vivo* na pokusnim životinjama. Predložena se istraživanja izravno nadovezuju na naša prethodna istraživanja u kojima smo pronašli predvodne spojeve iz reda pirimidinskih i purinskih derivata L-askorbinske kiseline (s najjačim i selektivnim inhibitornim djelovanjem *in vitro* na viruse HPV i HIV, i zloćudne tumore porijeklom iz čovjeka MiaPaCa-2 i HeLa), a također i derivata cikloalkil-N-arilhidroksamskih kiselina s najjačim djelovanjem i selektivnošću na citomegalovirus. Naša će istraživanja stoga biti usredotočena na optimiranje struktura navedenih predvodnih spojeva radi poboljšanja njihove učinkovitosti i smanjenja citotoksičnog djelovanja. Poseban je cilj istraživanja povećati učinkovitost antivirusnog djelovanja predvodnih struktura nukleozidnih

mimetika, njihovim prevođenjem u aminokiselinske fosforamidatne prolijekove. Predložena su istraživanja interdisciplinarna i strogo usmjerena. Očekujemo da će provođenje istraživanja na komplementarni i interdisciplinarni način djelovati sinergistički, te da ćemo polučiti glavni cilj istraživanja, sintetizirati nove spojeve s učinkovitim i selektivnim antivirusnim ili antitumorskim djelovanjem.

Projekt 125-0982464-2925

Razvoj i primjena novih molekula u pozitronemisijskoj tomografiji (PET)

Voditelj: Silvana Raić-Malić

Sažetak: Pozitron-emisijska tomografija (PET) je neinvazivna znanstvena i klinička metoda koja rabi molekule obilježene pozitron emitirajućim izotopima (^{18}F , $t_{1/2} = 109,7$ min; ^{11}C , $t_{1/2} = 20,4$ min; ^{13}N , $t_{1/2} = 10$ min; ^{15}O , $t_{1/2} = 2$ min) za praćenje biokemijskih procesa u organizmu. Klinička primjena metode PET značajna je za dijagnostiku i liječenje mnogih bolesti poput raka, neuroloških i kardiovaskularnih oboljenja. Osnovne prednosti primjene metode PET u onkologiji su rano otkrivanje raka, što je preduvjet za uspješno liječenje i dugotrajno izlječenje te bolesti, kao i praćenje rasta tumora i učinkovitosti kemoterapije i radioterapije. 2-(^{18}F)fluor-2-deoksi-D-glukoza, (^{18}F)FDG, je analog glukoze obilježen radioizotopom koji se najčešće primjenjuje u kliničkoj onkologiji. Budući da se glukoza nakuplja u stanicama raka, FDG služi za praćenje umnažanja tih stanica. No, u kliničkoj su primjeni FDG uočeni i nedostaci, prije svega njezino nespecifično nakupljanje u nemaliglnim stanicama, poput inflamatornih stanica, pa to može navesti na pogrešno tumačenje rasta tumora. Primjena nukleozida i aminokiselina obilježenih radioizotopima povoljnija je i specifičnija metoda, u odnosu na FDG, za praćenje proliferacije tumorskih stanica. Glavni je cilj predloženog istraživačkog projekta pripremiti nove molekule koje bi se mogle primijeniti u dijagnostici ili liječenju tumora, procjeni učinkovitosti terapije i detekciji povratka tumora s pomoću metode PET. Radi ostvarenja tog cilja provodit će se sljedeća istraživanja: (I) sintetizirat će se novi neobilježeni (^{19}F)fluorirani aciklički pirimidinski i purinski nukleozidni mimetici koji bi u interakciji s enzimom sudjelovali u sintezi DNA, ti bi se spojevi akumulirali u stanicama koje se brzo umnažaju i na taj način služili za otkrivanje tumora; sintetizirat će se i (^{19}F)fluorirani derivati neprirodnih aminokiselina koji bi se zbog povećanog transporta u tumorskim stanicama i brze ugradnje u proteine, također, mogli primijeniti za detekciju tumora; (II) ispitat će se antitumorsko i antivirusno djelovanje, kao i citotoksičnost novopripremljenih spojeva na normalne stanice; (III) sintetizirat će se odgovarajući prekursori sa zaštićenim funkcionalnim skupinama i provest će se njihovo označavanje pozitron emitirajućim radionuklidom ^{18}F ; (IV) biodistribucija novih markiranih molekula će se pratiti in situ kod miševa primjenom metode PET.

PROGRAM

DIZAJN, SINTEZA I REAKTIVNOST (BIO)ORGANSKIH MOLEKULARNIH SUSTAVA

NOSITELJ

Institut "Ruđer Bošković", Zagreb

VODITELJ

Mirjana Maksić

OPIS PROGRAMA

Program obuhvaća nekoliko vodećih istraživačkih laboratorija i grupa s ukupno 44 istraživača s Instituta "Ruđer Bošković", Farmaceutsko-biokemijskog fakulteta i Fakulteta kemijskog inženjerstva i tehnologije u Zagrebu iz područja (bio)organske, fizikalno-organske i kompjuterske kemije. Cilj programa je postizanje dodatne vrijednosti u kvaliteti istraživanja pomoću intenzivne međusobne suradnje, kako bi se poboljšao znanstveni output i povećala kompetitivnost na međunarodnom planu. Program se sastoji od sljedećih odabranih tema: (a) sinteza i karakterizacija novih spojeva širokog raspona, što uključuje s jedne strane derivate gvanidina, kavezaste ugljikovodike, mono i policikličke heteroaromatske molekule, velike makrocikličke polietere, ionske receptore, a s druge strane analoge peptida s neprirodnim aminokiselinama, kao i peptidne analoge fenolnih spojeva, koji se nalaze u biljkama; posebna pažnja poklonit će se razvoju novih stereoselektivnih sintetskih postupaka; (b) proučavanje reaktivnosti nekih od prethodno spomenutih spojeva u osnovnom i pobuđenim stanjima s naglaskom na reakcije prijenosa elektrona i protona (odnosno vodikova atoma); (c) mehanistički studij i identifikacija reakcijskih međuprodukata; (d) proširenje jedinstvenih skala elektrofugalnosti i nukleofugalnosti i njihovo testiranje; (e) dizajn organskih neutralnih superkiselina i superbaza primjenom kompjuterske kemije sa spajanjem njihovih skala u jedinstvenu ljestvicu; (f) studij strukture proteina i kataličke aktivnosti pomoću QM/MM modeliranja i kompjuterskih simulacija. Svaka od istraživačkih grupa koje sudjeluju u programu ima bogato iskustvo i znanstvenu izvrsnost u određenom segmentu predloženih istraživanja, što pruža široke mogućnosti interdisciplinarnе suradnje. Ova posljednja dovest će do sinergističkih efekata međusobnom fertilizacijom ideja, zajedničkim korištenjem eksperimentalnih uređaja i ostalih resursa. Time će se povećati kvaliteta i kvantiteta znanstvenih rezultata. Treba posebno naglasiti da se, pored fundamentalnih spoznaja, očekuje priprava novih spojeva ciljanih svojstava, kao i poboljšani kemijski postupci potencijalno korisni u industriji, farmakologiji i medicini.

>>

PROJEKTI

Aktivni projekt Fakulteta kemijskog inženjerstva i tehnologije na programu Dizajn, sinteza i reaktivnost (bio)organskih molekularnih sustava

125-0982933-2926 Heteropolicikli, strukturne osnove za bioaktivne spojeve.
Sinteza i fotokemija
Voditelj: Marija Šindler

Napomena:

Navedeni projekt pripada području Prirodnih znanosti, polje Kemija.

Projekt 125-0982933-2926

Heteropolicikli, strukturne osnove za bioaktivne spojeve. Sinteza i fotokemija

Voditelj: Marija Šindler

Sažetak: Istraživanja obuhvaćaju studij nezasićenih heterocikličkih i heteropolicikličkih sustava, njihovu sintezu i reakcije u osnovnom i pobuđenom stanju s ciljem dobivanja različitih hetero-policikličkih spojeva, strukturnih osnova za biološka ispitivanja. Naglasak je na fotokemijskim intra- i intermolekularnim cikoadicijama i pregrađivanjima, tj. korištenju svjetla kao najčišćeg reagensa. Studij uključuje heterocikličke spojeve s kisikom, dušikom, i sumporom kao heteroatomima (furan, tiofen, pirol, oksazol i sidnon derivati), određivanje strukture intermedijera i izoliranih produkata kao i mehanizme njihovih nastajanja.

PROGRAM

NOVI FUNKCIONALNI MATERIJALI

NOSITELJ

Institut "Ruđer Bošković", Zagreb

VODITELJ

Svetozar Musić

OPIS PROGRAMA

Program Novi funkcionalni materijali objedinio je znanstvenike iz Hrvatske koji rade u području organske, anorganske i fizikalne kemije, molekularne fizike i mikroelektronike. To je najveća grupacija znanstvenika koji rade na problematici funkcionalnih materijala u Hrvatskoj. Predlaže se istraživanje kompleksnih gelnih sustava nastalih miješanjem dvaju ili više konstitucijski neidentičnih gelova. Dizajnirat će se i sintetizirati nove organosilikatne hibride te istraživati efekt samoudruživanja različitih molekula. Novi kiralni spojevi upotrebit će se u sintezi novih kiralnih nepokretnih faza za tekućinsku kromatografiju te novih termotropnih tekućih kristala. Istraživat će se uvjeti i narav reverzibilne promjene spina elektronskog stanja u SCO kompleksima. Jedan od ciljeva ovog programa je proširiti naše spoznaje o odnosu između uvjeta sinteze metalnih oksida, oksidnih stakala i staklokeramika na jednoj strani, te njihovih svojstava na drugoj strani. Istraživat će se kinetike i mehanizmi kristalizacije različitih alumosilikatnih i karbonatnih spojeva. Sintetizirat će se i karakterizirati novi metal-organski spojevi s naglaskom na metale Ta i Nb. Istraživat će se sinteza i svojstva višekomponentnih metalnih hidrida koji sadrže metal rijetke zemlje, cirkonij, prijelazni metal ili plemeniti metal. Nadalje, istraživat će se fizikalno-kemijski učinci ionizirajućeg zračenja na modelnim sustavima koji uključuju organske, anorganske i biološke materijale, te razvijati nove dozimetrijske metode. Istraživat će se odnos između parametara pripreme, morfoloških i strukturnih svojstava na jednoj strani, te elektrokemijskih svojstava pripremljenih filmova na drugoj strani. Fundamentalni aspekt predloženih istraživanja je u iznalaženju mogućnosti modificiranja površine materijala s jako katalitički efikasnim tankim organskim ili anorganskim filmovima koji određuju mehanizam i kinetiku površinskih reakcija. Jedan od ciljeva ovog programa je unapređenje elektroanalitičke metodologije i elektrokemijske teorije. Novi funkcionalni materijali istraživat će se metodama eksperimentalne i teorijske vibracijske spektroskopije. Poseban doprinos predloženom programu dat će istraživanje novih elektroničkih materijala te projektiranje novih sklopova u mikroelektronici.

>>

PROJEKTI

Aktivni projekt Fakulteta kemijskog inženjerstva i tehnologije na programu Novi funkcionalni materijali

125-0982904-2923 Novi materijali i katalizatori za održive tehnologije
Voditelj: Mirjana Metikoš-Huković

Napomena:

Navedeni projekt pripada području Prirodnih znanosti, polje Kemija.

Projekt 125-0982904-2923 Novi materijali i katalizatori za održive tehnologije

Voditelj: Mirjana Metikoš-Huković

Sažetak: Osnovni cilj predloženog projekta je utvrđivanje odnosa između elektronske strukture, površinskih, električnih, dielektričnih i katalitičkih svojstava funkcionalnih materijala i strukture elektrificiranih granica faza. Fundamentalni aspekt predloženih istraživanja je u iznalaženju mogućnosti modifikiranja površine materijala visoko-efikasnim katalitičkim, tankim organskim ili anorganskim filmovima, koji određuju mehanizam i kinetiku površinskih reakcija. Upoznavanje i koreliranje njihovih fizikalnih i elektrokemijskih svojstava temelj je razumijevanja upotrebljivosti funkcionalnih materijala u održivim tehnologijama. Da bi se ostvarili ciljevi projekta predložimo tri skupine specifičnih istraživanja: (1) razvoj, sinteza i karakterizacija nano-strukturiranih katalizatora, koji su najskuplji i najsloženiji dio niskotemperaturnih membranskih gorivnih članaka i generatora vodika; (2) sinteza i karakterizacija samoorganizirajućih monoslojeva organskih molekula na anorganskim materijalima; (3) korozijska istraživanja metalnih biokompatibilnih i inženjerskih materijala temeljena na elektrokemijskom konceptu znanosti o materijalima. Istraživanja će se provoditi visokosofisticiranim *in-situ* i *ex-situ* tehnikama (elektrokemijske, vibracijske, optičko-analitičke, mikroskopske, vakuumske).

OPIS PROGRAMA

Sedam projekata integriranih u ovaj program su koncentrirani na istraživanje novih materijala za primjenu u građevinarstvu, s ciljem poboljšanja stanja postojećih konstrukcija i procedura projektiranja novih konstrukcija. Program pokriva područja građevinarstva od podzemnih građevina, preko prometnica, stambenih i infrastrukturnih konstrukcija, od bazičnih do vrlo naprednih istraživanja, uz primjenu standardnih i suvremenih mikroskopskih i valnih metoda mjerenja. Bazična istraživanja će pokriti ispitivanja mehaničkih, fizikalnih i kemijskih svojstava svake pojedine komponente, kao što je cement, agregat, glina, stijena, mineralni i kemijski dodaci, čelik i vlakanca. Razvoj cementne matrice će biti istraživan na nano, mikro, mezo i makro razini. Eksperimentalni dio istraživanja će uključivati laboratorijska ispitivanja cementnih kompozita i betona u svježem i očvrslom stanju, uz primjenu standardnih i suvremenih metoda ispitivanja. U sljedećoj će se fazi istraživati primjena mineralnih i kemijskih dodataka cementu i betonu, s ciljem određivanja optimalnog sastava za primjenu u stvarnim konstrukcijama izloženim različitim uvjetima okoliša. Simuliranjem procesa degradacije, kao što su korozija uzrokovana kloridima i/ili karbonatizacijom, sulfatna korozija, smrzavanje i odmrzavanje, soli, vlaga, povišene temperature i požar, određivat će se ponašanje materijala, što će biti baza za razvoj numeričkih modela za opisivanje tih procesa. U modernim gradovima često postoji potreba za temeljenjem teških objekata i infrastrukturnih građevina na tlu male krutosti, odnosno nedovoljne krutosti. Tehnološki postupci zbijanja i miješanja postojećeg tla s prirodnim i umjetnim materijalima su moguća rješenja za takve situacije. Kao rezultat nastaje novi materijal, koji je također vrsta cementnog kompozita. Unutar programa, svojstva tog materijala će se istraživati u laboratoriju i na terenu, na poboljšanom tlu i stijeni. Također će se razvijati novi konstitucijski model tla, uz primjenu saznanja iz eksperimentalnih istraživanja. Drugi matematički modeli će se razvijati u programu, za opisivanje fizikalnih i kemijskih promjena materijala općenito, a posebice armiranog betona, kao jednog od najprimjenivijih materijala u građevinarstvu. Cilj programa je poboljšati stanje postojećih konstrukcija primjenom novih materijala i djelotvornijih sustava zaštite, te unaprijediti metode projektiranja novih betonskih i geotehničkih konstrukcija, čime se dobiva novi materijal.

>>

PROJEKTI

Aktivni projekt Fakulteta kemijskog inženjerstva i tehnologije na programu Novi materijali u građevinarstvu

125-0822161-2982 Inhibicija korozije prirodnim spojevima: od molekulskih modela do primjene
Voditelj: Sanja Martinez

Napomena:

Navedeni projekt pripada području Tehničkih znanosti, polje Kemijsko inženjerstvo.

Projekt 125-0822161-2982

Inhibicija korozije prirodnim spojevima: od molekulskih modela do primjene

Voditelj: Sanja Martinez

Sažetak: Korozija je proces tijekom kojeg fizikalno-kemijskim međudjelovanjem metala i njegova okoliša dolazi do prijelaza metala u termodinamički povoljnije stanje korozivnih produkata. Krajnja posljedica korozije je gubitak funkcionalnosti metala u inženjerskom sustavu. Procijenjeno je da troškovi uzrokovani korozijom u razvijenim zemljama iznose 2 – 4,5 % BDP-a. Kako bi bili konkurentni na tržištu, mnogi suvremeni tehnološki sustavi temelje se na jeftinim konstrukcijskim materijalima sklonim koroziji. Modifikacija površine inhibitorima korozije važan je pristup sprječavanju i smanjenju rezultirajućih korozivnih problema. Stoga je pronalazak novih efikasnih inhibitora i izučavanje mehanizma njihovog djelovanja tema mnogih znanstvenih istraživanja. Upotreba sintetskih inhibitora povezana je sa zdravstvenim i ekološkim opasnostima, pa se u novije vrijeme težište istraživanja prebacuje na inhibitorско djelovanje bioloških molekula ili mješavina prirodnih spojeva. Većina literaturnih referenci bavi se djelovanjem inhibitora prirodnog podrijetla na ravnomjernu koroziju u kiselom mediju. Mehanizam djelovanja inhibitora u neutralnom i lužnatom mediju, zbog pojave lokalnih oblika korozije, vrlo je složen, a broj radova koji se bave tom problematikom je ograničen, iako je ona od velike praktične važnosti. Ohrabrujući rezultati djelotvornosti prirodnih spojeva u neutralnom i lužnatom mediju otvaraju novo područje u istraživanjima inhibitora korozije. Cilj predloženog projekta bit će utvrđivanje mogućnosti primjene netoksičnih prirodnih spojeva kao inhibitora korozije konstrukcijskih metala u različitim inženjerskim sustavima, posebno u neutralnim i lužnatim korozivnim medijima koji sadrže agresivne ione (npr. morska voda, porna voda betona zagađena kloridima, slojna voda u naftovodima). Koristit će se računalne tehnike semi-empirijskog molekulskog modeliranja koje daju svojstva molekula bitna za inhibitorско djelovanje. Eksperimentalna istraživanja uključivat će osnovne elektrokemijske tehnike: polarizacijski otpor, polarizaciju u Tafelovom području, anodnu polarizaciju, elektrokemijsku impedancijsku spektroskopiju, tranzijentne tehnike i cikličku voltometriju. Za analizu površine metala i površinskog sloja inhibitora bit će korištene neke od spektroskopskih metoda. Unutar predloženog znanstvenog programa bit će napravljen značajan pomak prema primjeni, testiranjem djelovanja najefikasnijih inhibitora na koroziju čelika u betonu.

OPIS PROGRAMA

Promjene u energetici na početku ovog stoljeća posljedica su ograničenih rezervi fosilnih energetskih goriva i njihove globalne raspodjele. Porast potražnje utječe na rast cijena energije, a osobito nafte i prirodnog plina. Kako Hrvatska 40 % energetskih potreba podmiruje iz nafte i 27 % iz prirodnog plina, naše energetske tržište presudno zavisi o opskrbi naftom i plinom. U tome posebnu ulogu imaju domaći resursi i proizvodnja nafte i plina. Definicija dokazanih rezervi nafte, prirodnog plina i njegovih kapljevina podrazumijeva ostvarenje rentabilne proizvodnje, koja se pri sadašnjem tehnološkom stanju ostvaruje iz konvencionalnih ležišta nafte i plina. Primjenom naprednih tehnoloških postupaka, veći dio starih ležišta, slabo propusnih ležišta i zaobiđene nafte u ležištu može se osposobiti za rentabilnu proizvodnju, te izravno povećati pridobive (bilančne) rezerve nafte i plina, odnosno konačni iscrpak u otkrivenim ležištima. Time se omogućuje povećanje pridobivog potencijala nafte i plina, te tako utječe na povećanje vrijednosti nacionalnih energetskih mineralnih sirovina. Predloženi znanstveni program sastoji se od više projekata, kojima se predviđa unaprjeđenje postojećih i razvoj novih tehnologija proizvodnje nafte i plina, razvoj tehnologija korištenja plina, poboljšanje zaštite okoliša i racionalno korištenje energetskih mineralnih sirovina. Zajednička poveznica je tehnološko optimiranje, gospodarska racionalizacija i povećanje vrijednosti nacionalnih energetskih resursa u uvjetima sve skuplje energije, a osobito nafte i plina na svjetskom tržištu. Znanstvenim programom osigurat će se primjena novih znanstvenih rezultata, razvoj i optimiranje tehnoloških rješenja, te bolja valorizacija energetskog potencijala i korištenja energetskih mineralnih sirovina u Hrvatskoj. Ovim programom i projektima zatvara se energetska lanac, od energetskih izvora do korištenja energije, uključujući zaštitu okoliša i ekonomiku, primjenu novih tehnologija i novi pristup racionalnom korištenju energije. Predloženom programom nastavljaju se i proširuju istraživanja iz proteklog razdoblja, uz intenziviranje interdisciplinarnog i međunarodne znanstvene suradnje, kojom bi se omogućilo kompleksno valoriziranje domaće nafte i plina u uvjetima održivog razvoja.

>>

PROJEKTI

Aktivni projekt Fakulteta kemijskog inženjerstva i tehnologije na programu Održivo gospodarjenje energetskim mineralnim sirovinama u Hrvatskoj

125-1951390-3000 Sniženje specifične potrošnje energije u industrijskim procesima
Voditelj: Rajka Budin

Napomena:

Navedeni projekt pripada području Tehničkih znanosti, polje Kemijsko inženjerstvo.

Projekt 125-1951390-3000

Sniženje specifične potrošnje energije u industrijskim procesima

Voditelj: Rajka Budin

Sažetak: Sniženje industrijskog energetskog intenziteta povišenjem učinkovitosti i diverzifikacijom izvora i energenata je ključni prioritet dugoročne energetske sigurnosti i zaštite okoliša. Ovakve spoznaje proistječu iz rezultata prethodna tri projekta financirana od Ministarstva znanosti HR (1990.-1995.; 2-05-024); (1996.-2002.; 125-009) i (2002.-2006.; 0125009). Zbog toga je ovdje predloženi istraživački projekt neophodan nastavak prethodnih. Osnovni cilj istraživanja je analiza utjecaja energije na mrežu industrijskih procesa. Predloženi projekt daje smjernice za učinkovitije procese sa stanovišta gospodarjenja energijom i održivog razvoja. Za gospodarjenje energijom bitan korak je osiguranje predloženih mjera prilikom planiranja i korištenja energije. U tu svrhu treba utvrditi sve vrste utrošenih energija i energenata, mjesta potrošnje, gubitke, kao i stupanj učinkovitosti. Na osnovi relevantnih podataka predložit će se postupci i dati prijedlozi za daljnje aktivnosti na području povišenja učinkovitosti. U nizu industrijskih procesa uočene su značajne mogućnosti sačuvanja energije primjenom sekundarnih izvora, tj. povrata otpadnih toplina. S obzirom na održivi razvitak istražiti će se alternativni obnovljivi i neobnovljivi izvori, njihova raspoloživost i ekonomičnost primjene. Kao podloga, obradit će se dinamika potrošnje u energetski intenzivnim industrijskim procesima, nakon čega će se predložiti mogućnosti sačuvanja, povišenja učinkovitosti i supstitucije izvora. Primjenom relevantnih podataka i metoda istraživanja dobivaju se rezultati koji objašnjavaju i dokazuju važnost sačuvanja i supstitucije energije. Time su obuhvaćeni povrat otpadnih toplina, alternativni izvori, kogeneracija i zagađenje okoliša. Istraživačke aktivnosti bit će usredotočene na daljnje unapređenje gospodarjenja energijom i zaštite okoliša, što se u industriji može ostvariti uz prihvatljive investicijske troškove. Rezultati i moguća primjena preporuka provjerit će se u cilju usklađivanja opskrbe i potrošnje na konkretnim proizvodnim procesima. Treba istaknuti značaj predloženog istraživanja koja unapređuje znanja na području sačuvanja energije i postizanja veće učinkovitosti. Poboljšanja u energetskom sektoru posebice su značajna, što se vidi iz strukture prioriteta energetske strategije EU i Republike Hrvatske. *“At what time does the dissipation of energy begin?”* William Thomson (Lord Kelvin, 1885.).

PROGRAM

HRVATSKA STANDARDNOJEZIČNA LEKSIKOLOGIJA I LEKSIKOGRAFIJA

NOSITELJ

Institut za hrvatski jezik i jezikoslovlje, Zagreb

VODITELJ

Mirko Peti

OPIS PROGRAMA

Program Hrvatska standardnojezična leksikologija i leksikografija jedan je od primarnih i dugoročnih znanstveno-istraživačkih programa Instituta za hrvatski jezik i jezikoslovlje u Zagrebu kao središnje znanstvene ustanove za proučavanje hrvatskoga jezika. Taj program obuhvaća temeljna istraživanja strukture standardnoga hrvatskoga leksika na svim razinama, od morfološke preko značenjske do terminološke i normativne, uključujući i izradbu različitih tipova rječnika hrvatskoga jezika, od jednosvezačnih malih školskih, preko općih i normativnih, do strukovnih, posebnih i višesvezačnih rječnika s iscrpnom obradbom hrvatskoga standardnojezičnoga leksika. U programu se nalazi i izradba opsežnoga reprezentativnoga korpusa hrvatskoga jezika koji treba poslužiti kao temelj za sva leksikološka istraživanja i leksikografske projekte. U sljedećih pet godina u okviru programa izradit će se hrvatski normativni jednosvezačni rječnik, hrvatski jezični savjetnik, valencijski rječnik hrvatskih glagola, rječnik hrvatskoga nazivlja u analitičkoj kemiji i mađarsko-hrvatski rječnik. Kao sastavni dijelovi programa Hrvatska standardnojezična leksikologija i leksikografija, svi će navedeni projekti, kad budu završeni, pridonositi uspješnijem organiziranju rada na velikom višesvezačnom rječniku hrvatskoga jezika. Važnost je temeljitoga istraživanja hrvatskoga leksika golema. Prvo, tim se istraživanjem hrvatski jezik definira kao samostalan jezični entitet. Drugo, obogaćuje se hrvatska jezična kultura. Treće, omogućuje se prezentiranje hrvatskoga jezika kao samostalnoga jezičnog entiteta stranim slavistima i široj međunarodnoj javnosti. Od rezultata istraživanja korist će dakle biti višestruka.

>>

PROJEKTI

Aktivni projekt Fakulteta kemijskog inženjerstva i tehnologije na programu Hrvatska standardnojezična leksikologija i leksikografija

125-2120898-3148 Hrvatsko nazivlje u analitičkoj kemiji
Voditelj: Marija Kaštelan-Macan

Napomena:

Navedeni projekt pripada području Humanističkih znanosti, polje Filologija.

Projekt 125-2120898-3148 Hrvatsko nazivlje u analitičkoj kemiji

Voditelj: Marija Kaštelan-Macan

Sažetak: Kemijska analiza neizostavan je dio istraživanja u mnogim područjima znanosti i umjetnosti. Usporedo s njezinim razvitkom i primjenom nastajalo je hrvatsko analitičko nazivlje. Uza sva nastojanja ono dosad nije ujednačeno i prilagođeno hrvatskoj standardnojezičnoj normi. To se posebice odnosi na nazivlje u modernim analitičkim metodama i u primjeni analitičke kemije za osiguravanje kvalitete materijala, proizvoda i okoliša te u normizaciji, gdje se nazivlje nekritički prenosi iz engleskog jezika. Hrvatska kao dio svjetske razmjene znanja i informacija mora imati definiran svoj jezik znanosti. Predlagači projekta Hrvatsko nazivlje u analitičkoj kemiji žele da on postane čvrsta karika u lancu sustavnog rada na hrvatskom znanstvenom nazivlju. Cilj je projekta načiniti pojedinačne terminološke rječnike za analitičku kemiju općenito i za različite primjene analitičke kemije, ali konačni je cilj izraditi cjeloviti enciklopedijski rječnik hrvatskoga analitičkoga nazivlja. Drugi je cilj projekta bolje povezati analitičke kemičare s lingvistima u zajedničkom nastojanju da se obogati hrvatsko rječništvo, posebice ono vezano uz znanstveno i stručno nazivlje. U tu će se svrhu pregledati postojeća arhivska građa te ostali objavljeni i neobjavljeni izvori (rječnici, knjige, časopisi, udžbenici, norme, dokumenti, interna skripta i sl), prevesti Compendium of Analytical Nomenclature (IUPAC) i europski dokumenti povezani s analitičkom kemijom. Slijedi sređivanje i usklađivanje naziva te objavljivanje rezultata. Hrvatsko nazivlje u analitičkoj kemiji treba uspostaviti i normirati, ono treba biti prihvaćeno na svim strukovnim i državnim razinama i primjenjivano od osnovne škole do fakulteta i državnih institucija. Autori očekuju da će završetkom projekta i prihvaćanjem njegovih rezultata u hrvatskoj znanstvenoj i stručnoj javnosti početi prevladavati svijest o nužnosti korištenja hrvatskih izraza u svakodnevnoj stručnoj komunikaciji, a naročito u znanstvenom i nastavnom radu. Radom na projektu obogatit će se hrvatski znanstveni jezik i privesti završetku nastojanja prethodnih generacija, što je velik izazov.

>> **PROJEKTI**

- 125-0821504-1976 Istraživanje, razvoj i ocjena polimernih kompozita za primjenu u građevinarstvu
Voditelj: Zlata Hrnjak-Murgič
Znanstveno područje / Polje: Tehničke znanosti / Kemijsko inženjerstvo
- 125-1252086-2793 Biokatalizatori i biotransformacije
Voditelj: Đurđa Vasić-Rački
Znanstveno područje / Polje: Biotehničke znanosti / Biotehnologija
- 125-0000000-1970 Primjena biološke imobilizacije za uklanjanje nitrata iz površinskih voda
Voditelj: Lucija Foglar
Znanstveno područje / Polje: Tehničke znanosti / Kemijsko inženjerstvo
- 125-0000000-3210 Razvoj novih senzora za mjerenje biološki važnih analita
Voditelj: Stjepan Milardović
Znanstveno područje / Polje: Prirodne znanosti / Kemija
- 125-0000000-3221 Kemijski senzori s luminiscentnim poluvodičkim nanokristalima (Quantum Dots)
Voditelj: Ivana Murković Steinberg
Znanstveno područje / Polje: Prirodne znanosti / Kemija

Projekt 125-0821504-1976

Istraživanje, razvoj i ocjena polimernih kompozita za primjenu u građevinarstvu

Voditelj: Zlata Hrnjak-Murčić

Sažetak: U građevinarstvu polimerni kompoziti nalaze široku primjenu kao izolatori buke i topline, prigušivači vibracija, unaprjeđuju električna, izolacijska i mehanička svojstva konstrukcijskih građevnih materijala, povećavaju elastičnost, čvrstoću, kemijsku otpornost i otpornost na gorenje. Tako se vibracije nastale potresom kod zgrada ili transportom kod mostova mogu prigušiti upotrebom elastomernih ležajeva, budući da je elastomerna komponenta ležaja viskoelastični materijal koji dobro podnosi tlačna i vlačna naprezanja. Tribologija polimera punjenih mikro/nanočesticama od velikog je interesa jer omogućuje promjene svojstava polimerne matrice. Nanopunila znatno smanjuju otpuštanje topline iz polimernih materijala jer ojačavaju karbonizirani ostatak koji stvara privremenu zaštitnu barijeru i tako usporavaju degradaciju matrice. Nanoelement polimernom kompozitu daje izuzetna mehanička svojstva koja su osnova za buduće generacije iznimno laganih, visoko elastičnih i vrlo snažnih materijala. Beton također poprima izuzetna mehanička svojstva dodatkom polimernih vlakana ili elastomera. Polimerna vlakna u kompozitima višestruko povećavaju čvrstoću, dok elastomer znatno smanjuje vibracije, apsorbira buku i poboljšava toplinsku izolaciju. Hipoteza projekta je postići uvjete dobrog međufaznog povezivanja komponenata tijekom pripreme višenamjenskih polimernih kompozita. Dobro međufazno povezivanje postiže se kemijskim modifikiranjem komponenata ili višestupanjskim procesom prerade. Obje metode uključuju optimizaciju fenomena na međufazi, što se postiže uspostavljanjem interakcija i kemijskim povezivanjem modifikiranih komponenata polimernih kompozita ili promjenom veličine i oblika mikro/nanočestica u matrici. Upotrebom navedenih oblika kompatibilizacije postiže se stabilna morfologija koja ima za posljedicu dobra mehanička svojstva materijala. Priprema polimernih kompozita provest će se metodama ekstrudiranja, miksiranja i umreživanja, pri čemu će se pratiti i modifikirati uvjeti prerade. Metode karakterizacije koje će se koristiti u istraživanju polimernih kompozita su: FTIR, DSC, DMA, SEM, TGA, LOI, test naprezanje-istezanje, smični modul. Cilj projekta je istražiti međufazne fenomene i razviti polimerne kompozite inovativnih ili unaprijeđenih svojstava s proširenim područjem primjene. Očekuje se da će ovako koncipiran projekt osigurati efikasno i uspješno provođenje u predloženim okvirima, a uspješnost realizacije projekta bit će vidljiva kroz objavljene radove.

Projekt 125-1252086-2793

Biokatalizatori i biotransformacije

Voditelj: Đurđa Vasić-Rački

Sažetak: Od ranih 1970-tih se u industriju uvodi sve veći broj procesa za sintezu posebnih ("finih") i tradicionalnih kemikalija, farmaceutskih i agrokemijskih intermedijera, koji se temelje na uporabi biokatalizatora i provedbi biotransformacija. Tako se danas u svijetu provodi preko 200 industrijskih procesa u kojima se upotrebljavaju biokatalizatori. Primjena biokatalizatora se stalno širi jer omogućava provedbu industrijskih procesa uz smanjenje otpada od npr. 10 na 2 tone po toni proizvoda, potpunu konverziju toksičnih sirovina, smanjenje utroška energije i uporabu obnovljivih sirovina. Bez dvojbe, zbog toga će industrijska primjena biokatalizatora i dalje, a posebno u sljedećih 10 godina stalno rasti. Ne treba posebno naglašavati što to znači kada se u industriji posebnih kemikalija proizvodi oko milijun tona otpada godišnje u svijetu. Upotreba biokatalizatora se pokazala kao dodatna tehnologija u kemijskoj industriji jer omogućava reakcije koje se klasično-kemijski teško provode ili kojima se zamjenjuju reakcije u više reakcijskih stupnjeva. Prema tome, visoko

kemo-, regio- i enantio-selektivne biotransformacije mogu pojednostavniti proizvodni proces i učiniti ga ekonomičnijim i prihvatljivijim za okoliš. Namjera projekta je da se istraži nekoliko industrijski zanimljivih biotransformacija, posebno onih koje se odnose na kontinuiranu sintezu posebnih kemikalija ili intermedijera. Ove reakcije će se studirati u vodenim i nevodenim medijima. Glavni cilj projekta je razvoj postupka provedbe u laboratorijskom mjerilu, industrijski interesantnih biotransformacija koje koriste sljedeće biokatalizatore: (1) liaze (fumaraza), (2) dehidrogenaze (ADH), koje trebaju koenzime NAD(P)H kao alkoholne redoks ekvivalente, koji se trebaju regenerirati i (3) oksidaze. Uz a) korištenje pročišćenih enzima i b) korištenje enzima u cijelim stanicama, razvit će se kontinuirani postupak provedbe sinteze L-jabučne kiseline, oksidacije alkohola i amino kiseline, te razgradnje lignina.

Projekt 125-000000-1970

Primjena biološke imobilizacije za uklanjanje nitrata iz površinskih voda

Voditelj: Lucija Foglar

Sažetak: Kvalitetno gospodarenje prirodnim resursima osnovni je preduvjet održivog razvoja. Uslijed snažnog antropogenog utjecaja tlo, zrak i voda trpe značajno kemijsko, biološko i vizualno onečišćenje. Sve to ukazuje na nužnost poduzimanja učinkovitih mjera za smanjenje negativnog utjecaja čovjeka na svoje okruženje. Takav pristup potiče zakonska regulativa i porast ekološke svijesti za osiguravanje čistije proizvodnje, pročišćavanje zagađenih prirodnih voda i obradu otpadnih voda prije ispuštanja u vodoprijamnike. Vode koje se koriste za javnu uporabu najčešće se prethodno pročišćavaju primjenom selektivnih ionskih izmjenjivača. Nitrat-selektivni izmjenjivači koriste se za uklanjanje nitrata, a otpadna otopina nastala ispiranjem izmjenjivača sadrži povećane koncentracije nitrata i NaCl-a i mora se prije ispuštanja obraditi. U tu svrhu se primjenjuje i metoda biološke obrade koja se koristi i u procesima obrade prirodnih voda. Uobičajeno se koriste slobodne stanice mikroorganizama, ali se istražuje i mogućnost primjene imobiliziranih stanica mikroorganizama. U ovom projektu istražiti će se mogućnost primjene imobiliziranih stanica za uklanjanje nitrata iz površinskih voda. Proces imobilizacije na zeolite i nitrat-selektivni izmjenjivač istražio bi se u svrhu postizanja veće učinkovitosti. Zeoliti kao nosioci bakterijskih stanica imaju brojne prednosti zbog svoje strukture i sastava, a osim toga postoje prirodni resursi dostupni u Hrvatskoj. Stanice imobilizirane na nitrat-selektivni izmjenjivač omogućuju istovremeno vezanje i razgradnju nitratnih iona na čestici izmjenjivača čime bi se izbjegla nužnost ispiranja izmjenjivača zbog zasićenja. Također će se predložiti kinetički model procesa, a rezultati laboratorijskih istraživanja primijenit će se u prirodnom okolišu. Optimiranjem parametara provedbe procesa očekuje se smanjenje već postojećeg zagađenja prirodnih voda, što pridonosi čistijem okolišu, a time i smanjenju brojnih posljedično-štetnih učinaka (eutrofikacija, pomor i smanjenje broja biljnih i životinjskih vrsta u vodama). Istovremeno, ostavit će se prostor i za istraživanje negativnih učinaka na okoliš uslijed djelovanja i drugih čimbenika.

Projekt 125-1252973-2576

Razvoj novih senzora za mjerenje biološki važnih analita

Voditelj: Stjepan Milardović

Sažetak: Kvaliteta života povezana je s mogućnostima kontrole bolesti, kontrole kvalitete hrane te kvalitete okoliša u kojem se živi. Da bi se održala kvaliteta potrebna su kontinuirana, brza i selektivna mjerenja najvažnijih parametara kojima se mogu opisati zbivanja u svakom od spomenutih područja. Biosenzori, male naprave koje se sastoje od biološkog elementa za prepoznavanje i pogodno odabranog pretvornika, predstavljaju moćan alat koji se vrlo uspješno koristi u mnogim područjima ljudske djelatnosti. Biosenzori također zadovoljavaju potrebe za jeftinim, a pouzdanim senzorima koji se koriste kako u centraliziranim laboratorijima, tako i za osobnu uporabu. Biološki element za prepoznavanje selektivno reagira s ciljanim analitom pa odziv senzora, u vrlo kompleksnim mjernim uzorcima (matricama), zavisi od pogodno odabranog biološkog elementa. Biološko prepoznavanje može se ostvariti biokatalizatorima (enzimi,

mikroorganizmi, tkivo) ili bioligandima poput antitijela, nukleinskih kiselina (DNK, RNK) i sl. Pretvornički element zadužen je da interakciju biološkog elementa i analita kvantificira u mjerni signal pogodan za daljnju obradu. Najčešće rabljeni pretvornici su amperometrijski, premda zadnja generacija tzv. afinitetnih biosenzora koristi piezoelektrične ili magnetske pretvornike. Grupa istraživača predložena ovim projektom niz godina se bavi razvojem i primjenom amperometrijskih biosenzora za mjerenje koncentracije metabolita i elektrolita. Do sada su konstruirani i razvijeni senzori za mjerenje glukoze u krvi te oksalata u urinu, hrani i piću. Razvijene su i elektrokemijske metode mjerenja ukupnog antioksidativnog kapaciteta i primjenjene u kompleksnim uzorcima kao što su uzorci hrane i pića. Cilj ovog projekta je razvoj novih biosenzora temeljenih na uporabi bioliganada ili biokatalizatora imobiliziranih na površini anorganskih nanostrukturiranih metalnih čestica, uglavnom srebrnih ili zlatnih nanočestica ili nemetalnih nanočestica poput ugljika. Moguće su i izvedbe uz uporabu nanočestica hidroksiapatita te hidroksiapatita modificiranog metalima poput rutenija, platine ili zlata. Izvest će se i afinitetni biosenzori na površinama modificiranim samoformirajućim monomolekulskim slojevima. Testirani analiti mogu biti: metaboliti, proteini, antioksidansi i DNK.

Projekt 125-000000-3221

Kemijski senzori s luminiscentnim poluvodičkim nanokristalima (Quantum Dots)

Voditelj: Ivana Murković Steinberg

Sažetak: Predloženi projekt bavi se razvojem funkcionalnih materijala za optičke senzore namijenjene upotrebi u integriranim kemijskim analitičkim sustavima. Optokemijski senzori dio su kemijskih senzora koji koriste optičku pretvorbu pri dobivanju analitičkog signala. Među optičkim metodama, fluorescencijske metode su posebno popularne zbog njihove velike osjetljivosti i brojnih parametara koji mogu poslužiti kao analitička informacija. Pretvorba spektroskopskih shema u korisne oblike senzorskih primjena zahtijeva korištenje odgovarajućih materijala kao što su polimeri, čestice, indikatorske probe, molekularni receptori, nosači, katalizatori ili fluorescentni poluvodički materijali. Atraktivna alternativa uobičajenim organskim fluoroforima su poluvodički nanokristali ili kvantne točke (engl. *quantum dots*, QDs). Kvantne točke su koloidni poluvodički nanokristali atraktivnih optoelektroničkih svojstava kao što su visoka emisijska kvantna učinkovitost, luminiscencija koja se može podešavati ovisno o veličini nanokristala, uske spektralne vrpce, i visoka kemijska i fotofizička stabilnost. Većina senzorskih primjena QD do sada je bila ograničena na "senzorsku kemiju" u otopinama. No, pokazano je da prijenos senzorske kemije u čvrstu fazu predstavlja novi izazov u primjeni QD, posebno kao osjetljivih elemenata u protočnoj analizi, mikrofluidičkim čipovima ili fluorescencijskim biočipovima. Glavni cilj ovog projekta je razvoj novih optičkih senzorskih shema utemeljenih na imobiliziranim QD nanokristalima. Projekt istražuje mogućnosti prijenosa postojećih kemijskih analitičkih metoda utemeljenih na fluorescentnim nanokristalima iz tekućeg u čvrsto stanje. U tu svrhu, koristeći različite materijale kao podloge i matrice, te imobilizacijom QD nanokristala upotrebom različitih metoda razvit će se novi fluorescentni materijali čija će se svojstva mijenjati u dodiru s potencijalnim analitima. Poseban naglasak bit će na metodama kompatibilnim sa standardnim tehnikama nanošenja polimernih filmova (npr. *screen printing*, *spin coating*, *array spotting*). Predviđa se da će fotofizička i kemijska karakterizacija materijala otkriti mogućnosti razvoja inovativnih senzora i generičkih shema senzorske pretvorbe utemeljene na novim svojstvima i interakcijama, posebno u definiranju specifičnih površinskih interakcija QD-analit, ili u pojavama prijenosa energije u sustavu QD-analit-matrica, kao što je rezonantni prijenos energije fluorescencije (FRET).

MEĐUNARODNE AKTIVNOSTI FAKULTETA KEMIJSKOG INŽENJERSTVA I TEHNOLOGIJE

Jedan od bitnih zadataka Fakulteta kemijskog inženjerstva i tehnologije je razvijanje međunarodne znanstvene i nastavne suradnje. Suradnja Fakulteta kemijskog inženjerstva i tehnologije s inozemnim sveučilištima, znanstveno-istraživačkim institucijama i međunarodnim udrugama od velike je važnosti za ostvarivanje temeljnih ciljeva razvoja Fakulteta i njegove vizije.

Otvorenost i kontakt s inozemnim ustanovama omogućuju nam stalnu usporedbu naših nastavnih programa i znanstvenih dostignuća sa svjetskim trendovima, te prihvaćanje međunarodnih kriterija vrednovanja znanosti i sveučilišne nastave.

Međunarodne aktivnosti FKIT-a odvijaju se putem:

- Međunarodnih znanstvenih bilateralnih i multilateralnih projekata,
- Međusveučilišnih i međufakultetskih sporazuma,
- Razmjene istraživača, nastavnika i studenata,
- Organizacije međunarodnih skupova i savjetovanja,
- Rada u međunarodnim udrugama.

MEĐUNARODNI ZNANSTVENI PROJEKTI

Na Fakultetu kemijskog inženjerstva i tehnologije trenutno je aktivno 7 međunarodnih znanstveno-istraživačkih projekata. Najveći je broj bilateralnih projekata (5), putem kojih se ostvaruje uspješna suradnja s Kinom, Mađarskom i Slovenijom:

Tablica 5. Bilateralni međunarodni projekti Fakulteta kemijskog inženjerstva i tehnologije

Naziv projekta	Zemlja partner	Trajanje projekta
Smanjenje emisija hlapljivih organskih spojeva katalitičkim spaljivanjem i fotokatalitičkom oksidacijom	Kina	5.10.2007. 5.10.2009.
Industrijske biotransformacije u vodenom i nekonvencionalnim medijima	Mađarska	2007. –
Temeljna i primijenjena istraživanja vodljivih polimera	Mađarska	2007. –
Razvoj kromatografskih metoda određivanja proantocijanidina u hrani i prehrambenim dodacima	Slovenija	1.1.2007. 31.12.2008.
Priprava nanokompozita iz polimera i slojevitih silikata modificiranih s polionima	Slovenija	1.1.2007. 31.12.2008.

Na Fakultetu kemijskog inženjerstva i tehnologije u tijeku je provedba projekta Fonda “Jedinstvo uz pomoć znanja”, Program znanstvene suradnje:

Reduction of environmental risks posed by pharmaceuticals and their degradation products in process wastewaters, through RO/NF membrane treatment (REPHAD), UKF, 1.12.2007. – 30.11.2010.

Projekt se provodi u suradnji s Katalonskim institutom za istraživanja i napredne studije, Barcelona, Španjolska. Program znanstvene suradnje Fonda “Jedinstvo uz pomoć znanja” odvija se kroz suradnju dijaspore i domaćih znanstvenika koji bi trebali uspostaviti trajan odnos te omogućiti prijenos znanja i privući ulaganja u Hrvatsku kako iz međunarodnih izvora (primjerice Sedmog okvirnog programa), tako i iz gospodarstva.

Znanstvenici Fakulteta kemijskog inženjerstva i tehnologije sudjeluju u multilateralnom EUREKA projektu:

Natural Zeolites In Water Quality System, EUREKA, 1.5.2008. – 1.5.2011.

U projektu sudjeluju institucije iz Hrvatske, Slovenije i Srbije. Koordinator projekta je Kemijski institut (Slovenija). Uz Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije Sveučilišta u Zagrebu, ostali partneri u projektu su Tekstilno-tehnološki fakultet Sveučilišta u Zagrebu (Hrvatska), Cwg d.o.o. (Hrvatska), Silkem d.o.o. (Slovenija), Tehnološko-metalurški fakultet Sveučilišta u Beogradu (Srbija), Agronomski fakultet Sveučilišta u Beogradu (Srbija), Gm Water d.o.o. (Srbija). Glavni cilj programa EUREKA je potaknuti istraživačke napore tvrtki i razvoj inovacijskih kapaciteta, a rezultati projekta trebali bi biti novi proizvodi ili usluge koji promiču napredne tehnologije i imaju svoje mjesto na tržištu.

MEĐUSVEUČILIŠNI I MEĐUFAKULTETSKI SPORAZUMI

FKIT je dosada inicirao potpisivanje dva bilateralna međusveučilišna sporazuma. Sporazum s Panonskim Sveučilištem u Veszpremu (Pannon Egyetem, University of Pannonia), Mađarska, potpisan je početkom 2008. godine. Zahtjev za sklapanje bilateralnog sporazuma sa Švicarskim savezним institutom za tehnologiju u Zürichu (Eidgenössische Technische Hochschule, ETH) poslan je u svibnju 2008. U okviru bilateralnih sporazuma FKIT ostvaruje uspješnu dugogodišnju suradnju sa Sveučilištima u Ljubljani i Mariboru.

RAZMJENA ISTRAŽIVAČA, NASTAVNIKA I STUDENATA

U okviru bilateralne suradnje odvija se razmjena profesora i studenata, suradnja na znanstveno-istraživačkim projektima, te se organiziraju predavanja stranih predavača na našem Fakultetu. Isto tako, naši nastavnici održavaju predavanja na inozemnim sveučilištima.

Prikladan način razmjene nastavnika i suradnje s visokim učilištima u zemljama članicama EU ostvaruje se putem TEMPUS projekata. Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije koordinator je TEMPUS projekta:

Environmental Management – Policy and Sustainability Study (EMPS) International, Interdisciplinary, Postgraduate, Specialist Program, 1.9.2005. – 1.9.2009.

Kraći studijski boravci naših profesora organizirani su i u okviru CEEPUS projekata u kojima FKIT sudjeluje kao partner:

- **Education in separation and identification of organic xenobiotics in environmental samples and food product, CEEPUS, 2008. –**
- **Education of Modern Analytical and Bioanalytical Methods, CEEPUS, 2007. –**
- **International Study in Automatic Control, CEEPUS, 1.6.2005. – 1.6.2010.**

Nacionalna zaklada za znanost, visoko školstvo i tehnologijski razvoj Republike Hrvatske, u okviru programa "Priljev mozgova – Gost", odobrila je potporu projektu:

Distributed wireless sensors for smart chemical and biological detection systems: chemo- and biosensor interface and applications development, NZZ, "Priljev mozgova – Gost", 2008.

Projekt se provodi na Fakultetu kemijskog inženjerstva i tehnologije pod vodstvom gostujućeg znanstvenika. Zaklada osigurava potporu znanstvenih, visoko obrazovnih i tehnologijskih programa i projekata te poticanje međunarodne suradnje na području visokoga školstva. Cilj programa "Priljev mozgova – Gost" je omogućiti znanstvenicima iz inozemnih institucija rad na znanstvenoistraživačkom projektu u Hrvatskoj.

ORGANIZACIJA MEĐUNARODNIH SKUPOVA I SAVJETOVANJA

Jedan od istaknutijih oblika prisutnosti naših nastavnika u međunarodnim znanstvenim krugovima čini organizacija međunarodnih konferencija i seminara. U posljednjih pet godina, nastavnici Fakulteta kemijskog inženjerstva i tehnologije sudjelovali su kao članovi znanstvenih i organizacijskih odbora u organizaciji sljedećih skupova:

- 14th International Symposium on Separation Science "New Achievements in Chromatography", 30. rujna - 3. listopada 2008., Primošten, Hrvatska
- 10th International School of Ion Chromatography, 3.-6. lipnja 2008., Brijuni, Hrvatska
- 2nd International Conference on Laboratory Competence 2007 – The New Approach, 18.-20. listopada 2007., Cavtat, Dubrovnik, Hrvatska
- IUPAC International Workshop on the Impact of Scientific Developments on the Chemical Weapons Convention, 22.-25. travnja 2007., Zagreb, Hrvatska
- 2nd International Symposium on Environmental Management (SEM) "Environmental Management; Contribution to Solution", 12.-14. rujna 2007., Zagreb, Hrvatska
- International Symposium on Air and Water Pollution Abatement, AWPA 2007, 21.-23. lipnja 2007., Zakopane, Poljska
- 9th International School of Ion Chromatography, 4.-7. rujna 2006., Primošten, Hrvatska
- Young Investigator Seminar on Analytical Chemistry (YISAC), 5.-8. srpnja 2006., Zagreb, Hrvatska
- International Symposium on Air Pollution Abatement Catalysis, APAC 2005, 21.-24. rujna 2005., Krakov, Poljska

MEĐUNARODNE UDRUGE

Djelatnici Fakulteta kemijskog inženjerstva i tehnologije sudjeluju u radu brojnih međunarodnih udruga.

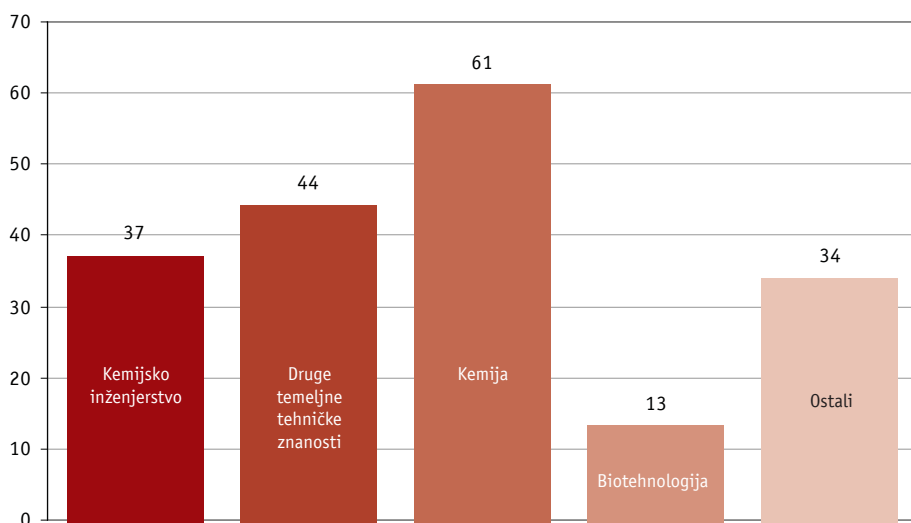
Tablica 6. Djelatnost u okviru međunarodnih udruga

Naziv udruge	Ime	Svojstvo
Europska federacija za kemijsko inženjerstvo (EFCE)	Vesna Tomašić	Predstavnik Hrvatskog društva kemijskih inženjera i tehnologa
Europska polimerna federacija (EPF)	Marica Ivanković	Hrvatski predstavnik
Europska federacija za biotehnologiju (EFB). Sekcija za primijenjenu biokatalizu (ESAB)	Đurđa Vasić-Rački	Član Znanstvenog odbora
Mreža sveučilišta iz europskih glavnih gradova (UNICA)	Helena Jasna Mencer	Član Upravnog odbora Član radne skupine za EU projekte
Europski savjet za zaštitu okoliša i održivi razvitak (EEAC)	Natalija Koprivanac	Član radne skupine za održivi razvitak
Europsko udruženje sveučilišta (EUA). Povjerenstvo za vrednovanje u u okviru Programa institucijskog vrednovanja	Helena Jasna Mencer	Evaluator, stalni član povjerenstva
Mađarsko akreditacijsko vijeće (HAC)	Helena Jasna Mencer	Vanjski ekspert

ČASOPISI

Tijekom posljednjih pet godina nastavnici i znanstvenici FKIT-a objavljivali su svoje znanstvene rezultate u ukupno 150 različitih časopisa citiranih u bazi Current Contents. Najveći broj časopisa iz područja je kemijskog inženjerstva, inženjerstva i znanosti o materijalima, kemije, biotehnologije te znanosti o okolišu.

Na Slici 1 prikazana je brojnost časopisa u kojima objavljuju znanstvenici FKIT-a, prema znanstvenim poljima u kojima djeluju (kemijsko inženjerstvo, druge temeljne tehničke znanosti – grana materijali, kemija i biotehnologija). Časopisi su razvrstani u područja prema podacima iz WOS i Scopus).



Slika 1. Brojnost časopisa obuhvaćenih bazom Current Contents u kojima su u posljednjih pet godina objavljivali djelatnici FKIT-a, prema znanstvenim područjima. Kategorija ostali obuhvaća časopise iz područja matematike (3), fizike (4), biokemije (2) i znanosti o okolišu (13).

Srednja vrijednost faktora utjecaja časopisa u kojima objavljuju djelatnici FKIT-a za 2006. godinu iznosi 1,946.

Srednja vrijednost faktora utjecaja po pojedinim poljima je:

- kemijsko inženjerstvo: 1,723;
- druge temeljne tehničke znanosti: 1,931
- kemija: 2,124
- biotehnologija: 1,765

Časopisi u kojima djelatnici FKIT-a najčešće objavljuju su:

- Journal of Applied Polymer Science, materijali, IF=1,306
- Chemical and Biochemical Engineering Quarterly, kemijsko inženjerstvo, IF=0,357
- Electrochimica Acta, kemija, kemijsko inženjerstvo, IF=2,995
- Journal of Medicinal Chemistry, kemija, IF=5,115
- Bioorganic & Medicinal Chemistry, kemija, IF=2,624
- Croatica Chemica Acta, kemija, IF=0,778
- Journal of the Electroanalytical Chemistry, kemija, IF=2,339
- Journal of Hazardous Materials, kemijsko inženjerstvo, okoliš, IF=1,855.

Od drugih znanstvenih časopisa u kojima objavljuju naši znanstvenici vrijedi istaknuti:

- Catalysis Today
- Chemical Engineering Journal
- Chemical Engineering and Processing
- Chemical Engineering & Technology
- Industrial and Engineering Chemistry Research
- Journal of Membrane Science
- Journal of Separation Science
- Separation and Purification Technology
- Chemical and Biochemical Engineering Quarterly
- International Journal of Chemical Reactor Engineering
- Water Research
- Dyes and Pigments

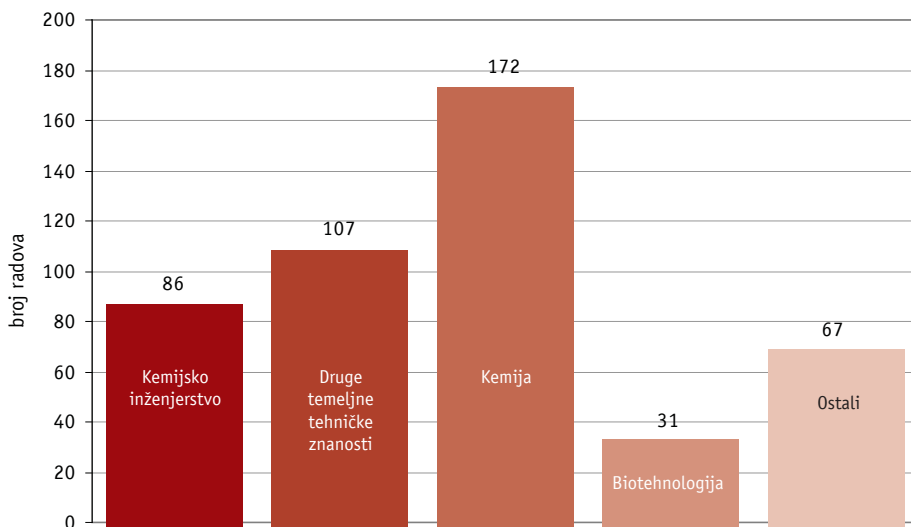
- Journal of Applied Polymer Science
- Journal of the European Ceramic Society
- Journal of Non-Crystalline Solids
- Journal of Polymer Science Part A - Polymer Chemistry
- Polymer Degradation and Stability
- Thermochemica Acta

- Electrochemistry Communications
- Electrochimica Acta
- Journal of the Electroanalytical Chemistry
- Journal of the Electrochemical Society
- Journal of Chromatography A
- Talanta
- TrAC Trends in Analytical Chemistry
- Journal of Medicinal Chemistry
- Journal of Organic Chemistry
- Journal of Photochemistry and Photobiology A – Chemistry
- Chemistry A-European Journal
- Tetrahedron
- Tetrahedron Letters

- Biotechnology and Bioengineering
- Enzyme and Microbial Technology
- Advances in Biochemical Engineering/Biotechnology
- Bioresource Technology
- Biosensors & Bioelectronics
- Process Biochemistry

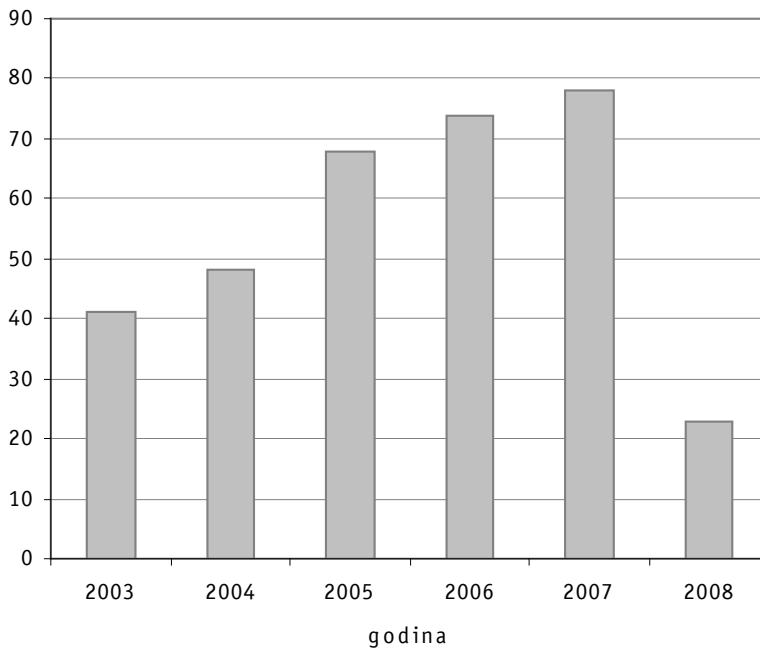
RADOVI

Na Slici 2 prikazana je brojnost radova koji su u posljednjih pet godina objavili nastavnici FKIT-a, prema znanstvenim područjima.



Slika 2. Brojnost radova u časopisima obuhvaćenima bazom Current Contents koje su u posljednjih pet godina objavili djelatnici FKIT-a, prema znanstvenim područjima. Kategorija ostali obuhvaća radove iz područja matematike, fizike, biokemije i znanosti o okolišu.

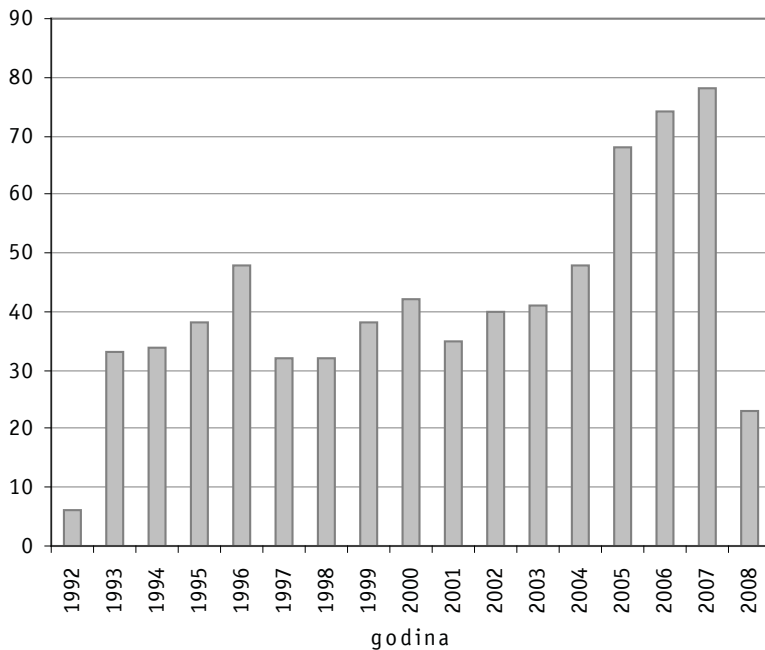
Na Slici 3 prikazana je brojnost radova prema godinama.



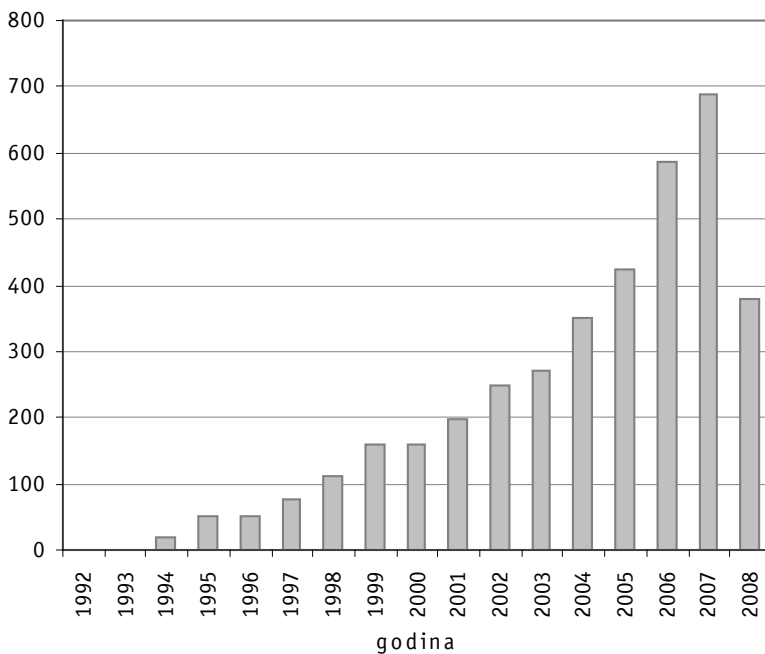
Slika 3. Brojnost objavljenih radova u časopisima prema bazi Web-of-Science, WOS.

Na Slici 4 prikazana je brojnost objavljenih radova u duljem vremenskom periodu, od 1992. godine i citiranost tih radova.

a)



b)



Slika 4. a) brojnost objavljenih radova u časopisima prema bazi Web-of-Science, WOS; b) citiranost tih radova.

Sveukupno, 719 radova citirano je 3798 puta. Srednja citiranost po radu iznosi 5,28, a institucijski h-indeks je 26.

Velik dio djelatnosti na Fakultetu kemijskog inženjerstva i tehnologije čine stručni projekti, kojima se znanja stečena znanstvenim radom prenose u gospodarstvo. U posljednje dvije godine izveo se, ili se još izvodi, 18 stručnih projekata. Osam projekata trajalo je do tri mjeseca, šest projekata trajalo je od tri mjeseca do godine dana, a četiri projekta trajala su dulje od godinu dana. Projekti su prikazani u Tablici 7.

Najveći broj projekata odnosi se na izradu studija utjecaja na okoliš te rješavanje problema pročišćavanja otpadnih voda.

Projekt "pametne zgrade" napravljen je prvi puta u Hrvatskoj po uzoru na Švicarsku, gdje se uspješno primjenjuje Minergie standard. Njegovu primjenu na "zgradi budućnosti" osmislio je zagrebački Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije u suradnji sa švicarskim tvrtkama SENCON Energy GmbH, Appenzell i WILD und Partner AG, Appenzell.

Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije radi na novom projektu zaštite okoliša, nazvanom "E-dom", zgradi koja će biti napravljena od prirodnih materijala, energetski učinkovita i ekološki održiva i u skladu s načelima zdravog stanovanja.

Tablica 7. Stručni projekti na Fakultetu kemijskog inženjerstva i tehnologije u posljednje dvije godine

Naziv projekta	Tvrtka naručitelj	Godina izvedbe	Trajanje
Izrada interaktivne bilance tvari i energije "black box" tipa za proces taljenja sirovina u kupolnoj peći	Knauf Insulation d.o.o. Novi Marof	2008.	Do tri mjeseca
Izrada projektne dokumentacije za skladište metanola za postrojenje za proizvodnju biodizela	Biona d.o.o. Varaždin	2008.	Do tri mjeseca
Izrada osnovnog tehnološkog projekta za projekt 16-28 Apsorpcija plinova sekcije reaktora	Petrokemija d.d. Kutina	2007.	Do tri mjeseca
Izrada studije o utjecaju na okoliš za izgradnju pogona za proizvodnju biodizela	INGRA d.d. Zagreb	2007.	Do tri mjeseca
Studija o utjecaju na okoliš za tvornicu biodizela u Vukovaru	Europa Mil-biogoriva d.o.o.	2007.	Do tri mjeseca
Izrada elaborata energetske učinkovitosti (Stambeno-poslovna građevina)	Agria d.o.o. Karanac - Osijek	2007.	Do tri mjeseca
Izrada studije o utjecaju na okoliš za gospodarsko-proizvodni pogon mobilne betonare	Unija d.o.o. Vukovar	2007.	Do tri mjeseca
Izrada studije o utjecaju na okoliš za tvornicu biodizela	KAMIX d.o.o. Varaždin	2007.	Do tri mjeseca
Ocjena funkcionalnosti i pripremljenosti urođenih membrana u sustavima za pročišćavanje otpadnih voda	Tekija d.o.o. Požega	2007.	Tri mjeseca do godine dana
Pročišćavanje otpadnih voda pogona Azitromicina u Savskom Marofu	Pliva Hrvatska d.o.o. Zagreb	2007.	Tri mjeseca do godine dana
Uvjeti postizanja Minergije standarda u Lameli I stambeno poslovne građevine u Osijeku	Agria d.o.o. Karanac - Osijek	2007.	Tri mjeseca do godine dana
Ispitivanje vanjske korozije prema normi NACE RP0502 cjevovoda Jadranskog naftovoda	Jadranski Naftovod d.d. Zagreb	2007.	Tri mjeseca do godine dana
Izrada studije s prijedlogom optimalnog redizajniranja temeljnih i pomoćnih pogona Rafinerije nafte Sisak	Centar za transfer tehnologije Zagreb	2007.	Tri mjeseca do godine dana
Izrada studije o utjecaju na okoliš Postrojenja za kondicioniranje otpadnih ulja i zauljenog otpada	Rijekatank d.o.o. Zagreb	2007.	Tri mjeseca do godine dana
Sporazum o suradnji u području doktorskih i specijalističkih studija, te realizacija znanstveno-istraživačkih i razvojnih projekata	Končar-Institut za elektrotehniku d.d. Zagreb	2008. –	Preko godine dana
Doprinos očuvanju ekosustava obradom otpadnih vodotokova u DINA-Petrokemiji Omišalj	DINA-Petrokemija d.d. Omišalj	2008. –	Preko godine dana
Odsumporavanje FCC benzina kapljevinskom ekstrakcijom	INA Industrija nafte d.d.	2006. –	Preko godine dana
Optimiranje izomerizacije lakog benzina	INA Industrija nafte d.d.	2006. –	Preko godine dana





SCIENTIFIC PROGRAMS AND PROJECTS AT THE FACULTY

The Faculty of Chemical Engineering and Technology of the University of Zagreb is in charge of 6 scientific programs with, in total, 30 projects and 21 of them are being performed at the Faculty. The programs are listed in Table 2.

Table 3 lists programs lead by other institutions that include projects performed at FKIT.

Five scientific projects within the funding system of the Ministry of Science, Education and Sports of the Republic of Croatia that are performed at FKIT are self-contained.

Table 2. Scientific programs lead by FKIT, funded by the Ministry of Science, Education and Sports of the Republic of Croatia

Program title	Leader	Number of projects	Number of projects performed at FKIT
Chemical engineering in advanced technologies	Zoran Gomzi	7	7
Novel materials with target properties (NOMACIS)	Hrvoje Ivanković	5	3
Surface modification in multifunctional polymer systems	Jasenska Jelenčić	8	4
Development of advanced technologies for water treatment	Natalija Koprivanac	3	2
Modification and improvement of metal surfaces	Ema Stupnišek Lisac	4	2
Advanced water treatment and analysis	Laszlo Sipos	3	3
SUM			21

Table 3. Scientific programs within the Ministry of Science, Education and Sports funding system, that are lead by other institutions and include projects performed at FKIT

Program title	Institution in Charge	Number of projects performed at FKIT
Integrative genomics and proteomics in cancer research	Ruđer Bošković Institute, Zagreb	3
Design, synthesis and reactivity of (bio)organic molecular systems	Ruđer Bošković Institute, Zagreb	1
New functional materials	Ruđer Bošković Institute, Zagreb	1
New materials in civil engineering	Faculty of Civil Engineering, University of Zagreb	1
Sustainable management of energy resources (Hydrocarbons) in Croatia	Faculty of Mining, Geology and Petroleum Engineering, University of Zagreb	1
Croatian standard lexicology and lexicography	Institute for Croatian Language and Linguistics, Zagreb	1
SUM		8

Table 4. Self-contained projects of the Faculty of Chemical Engineering and Technology

Project title	Leader	Scientific field
Research, development and evaluation of polymer composites for use in civil engineering	Zlata Hrnjak-Murčić	Technical Sciences / Chemical Engineering
Biocatalysts and biotransformations	Đurđa Vasić-Rački	Biotechnical Sciences / Biotechnology
Application of biological immobilization for nitrate removal from surface water	Lucija Foglar	Technical Sciences / Chemical Engineering
Development of novel sensors for determination of biologically important analytes	Stjepan Milardović	Natural Sciences / Chemistry
Chemical sensors based on luminescent semiconductor nanocrystals (Quantum Dots)	Ivana Murković Steinberg	Natural Sciences / Chemistry
SUM		5

PROGRAM DESCRIPTION

Current level of chemical technology requires major structural changes both in the search into new, advanced or sustainable technologies as well as in restructuring of the existing ones in the light of the increasingly stringent environmental criteria. Chemical engineering has a crucial role in multidisciplinary and multilevel approach to complex systems. In the actual process this enables deeper integration of the basic physical and chemical principles with practical methodology. The aim of this program is the research within the disciplines of chemical engineering. Common to these disciplines is their contribution to development of the advanced technologies with integrated approach to environmental protection. This is contained in the new processes of desulphurization in motor oils, development of catalytic processes for reduction of the air emissions of harmful substances, aerobic composting of solid waste and optimization of copolymers. A part of the project refers to fundamental chemical engineering research: Analysis and modeling of chemical reactors; Modeling of the processes in heterogeneous systems, and Software sensors and analyzers for process monitoring and management. The expected result is a consolidated approach, i.e. methodology, irrespective of the projects' research segment. This will create close cooperation between all researchers which will facilitate accomplishment of the designated goals. The scientific contribution of research defined for each project separately will be validated and double-checked through presentation of research results to international and local public in the published works and at scientific events in the country and abroad. Also, the results must be validated with respect to their practical efficiency. In other words, by the virtue of contracts or cooperation with the industry partners the research results must be implemented into the projects, studies or reports. Importance of research arises from the fact that both new and restructured technologies must comply with general global trends of development, i.e. the criteria of sustainable development and the latest scientific achievements. In addition to general scientific contribution, the research under curricula or projects would contribute to development of local industry and, very specifically, to implementation of chemical engineering in the new or restructured chemical technologies.

>>

PROJECTS

Active projects on the program Chemical engineering in advanced technologies

- | | |
|------------------|---|
| 125-1251963-1964 | Soft sensors and analyzers for process monitoring and control
Leader: Nenad Bolf |
| 125-1251963-1968 | Aerobic composting of solid waste in reactor system
Leader: Felicita Briški |
| 125-1251963-1972 | Process properties of disperse systems
Leader: Antun Glasnović |
| 125-1251963-1974 | The analysis and modeling of chemical reactors
Leader: Zoran Gomzi |
| 125-1251963-1980 | Optimization of copolymer properties using controlled radical polymerizations
Leader: Ante Jukić |
| 125-1251963-2573 | Application of catalysis in environmental protection
Leader: Stanka Zrnčević |
| 125-1251963-2580 | Advanced processes of hydrocarbon fuels desulfurization
Leader: Katica Sertić-Bionda |

Note:

All the projects on the program are being performed at the Faculty of Chemical Engineering and Technology and belong to the Technical Sciences, Chemical Engineering field.

Project 125-1251963-1964

Soft sensors and analyzers for process monitoring and control

Leader: Nenad Bolf

Summary: One of the frequent problems encountered in the process monitoring and control is the impossibility of the continuous measurement and analysis of key process values, especially when dealing with composition of process streams and product properties. Development of advanced sensors based on new technologies of analytical chemistry and modern electronic devices represents an important area of scientific research; however, price of such a development is very high. Software sensors (virtual soft sensors, soft analyzers) are models used for estimating the immeasurable process conditions based on available measuring of input and output variables. Easily measurable secondary variables are used for deducing the values of process variables that are difficult to measure. Reasons for applying software sensors are: impossibility of real time measurement due to lack of appropriate instruments, long data processing and analysis time, as well as way too high sensor installation and maintenance expenses. Today, software sensors are becoming an area of increased interest and an important alternative to expensive on-line measurements where – based on analytical and empirical models – one can conclude about variables that are difficult to measure. Artificial neural networks are broadly instrumented in this area, especially in modeling of complex and non-linear processes, where they are combined to statistical methods for identification, and they are used for the process optimization purposes. In this research, the mentioned methods are applied for the development of software sensor models, as well as for the inferential process control based on them. The possibilities for applying the proposed research are wide, especially in the process industry, but also in other areas, such as in the biochemical research.

Project 125-1251963-1968

Aerobic composting of solid waste in reactor system

Leader: Felicita Briški

Summary: Solid waste, such as industrial, agricultural and communal waste, yard waste and waste paper are clogging landfills. This introduces problems in finding new replacement sites. Disposal of solid waste in the Republic of Croatia is still a major national problem, and with only a few modern landfills available, majority of waste is still disposed of in dumps. During microbial decomposition of organic matter in dumps, leachate seeps through solid waste heap and finds its way into soil, surface and groundwater, while evolved gasses are released into surrounding air. Therefore, composting is an important element of sustainable solid waste management. The aim of this project is to investigate the aerobic composting of solid waste in a batch-operated column reactor. The result of this process is the recovery of organic waste material in the form of compost. Composting in the closed reactor is environmentally acceptable because it enables easier emission control of air pollutants (carbon dioxide, ammonia). The same applies to the leachate that is produced during biodegradation of solid waste. Air pollutants from the outlet air and leachate can be efficiently biologically treated. The composting of solid waste will be investigated in a laboratory-scale column reactor under adiabatic conditions. The reactor and kinetic model that represents the experimental results will be proposed. The results obtained in this research will be applied in the scale-up studies. At the end, chemical engineering approach (experimentation, modeling and simulation, process control and optimization) will be applied to design small composters that may be installed near manufacturing plant or agricultural complexes. A new product – compost obtained from waste can be usefully applied for landscaping, public parks, gardening and for improvement of agricultural soils. The purpose of this project is to prevent possible pollution of soil, groundwater and surrounding atmosphere. Stabilization of organic solid waste in closed reactor system under aerobic conditions is in accordance with environmental standards in developed countries in the European Union.

Project 125-1251963-1972 Process properties of disperse systems

Leader: Antun Glasnović

Summary: Today, more than 70 % of process industry (chemical, pharmaceutical, food...) is met with technological processes involving solid particles. For efficient dealing with such processes, the knowledge about the characteristics of solid particles (disperse phase), continuous phase (disperse medium), the rheological properties of disperse systems (suspension) and transport properties (which affect process characteristics of disperse systems in various technological processes – in this project the processes of grinding, granulation, crystallization and drying) is necessary. Special attention is paid to the solid particle characteristics (particle size distribution, shape, porosity, specific surface, pore size distribution, pore volume). Based on the previous work, that this research is continuing, a significant influence of stated characteristics of solid phase on rheological properties of suspension and on transport system properties in drying processes had been recognized. Acquired knowledge justifies the extension of research on the project Process properties of disperse systems. Based on this knowledge, there is a contemporary trend of research on the possibility of predicting the rheological properties of suspensions and their influence on the behavior of systems in the processes of wet grinding and granulation. By knowing the solid particle characteristics, prediction of the mechanism of moisture movement from the inside of the material is possible as well as the efficient implementation of the process of drying the products of wet grinding, the products of crystallization and of granulation.

Project 125-1251963-1974 The analysis and modeling of chemical reactors

Leader: Zoran Gomzi

Summary: Chemical reactors are indispensable for carrying out technological processes. Their types usually determine other process equipment and assemblies. Present level of technological development requires upgraded designs of reactors so as to increase efficiency of the entire process. This implies: integration of the reactors and separating process units into compatible systems for higher energy efficiency and performance; new reactor types suited to increasingly stringent occupational and environmental safety requirements; selection of optimal working conditions and reactors with respect to new technologies (new catalysts, new production technologies, use and production of new materials); selection and construction of optimal management and control systems based on modern IT technology. Mathematical modeling of chemical reactors provides presumptions for checking, simulation and evaluation of the proposed solutions for selection and identification of operating conditions. A starting point is the model which, based on its physical image, is capable of evaluating the assumptions related to its realization. Present project is aimed at showing that only with comprehensive and integrated approach one can meet current trends in development of chemical reactors and accommodate them to the advanced technologies. Basic research within the project scope include: analysis of the experiments aimed at checking kinetic models; selection of the reactors based on the process-related assumptions; design of the reactor's mathematical model, taking into account all relevant parameters (mass and energy balances, hydrodynamics, kinetics, presence of a catalyst and constraints of the working conditions); reality testing of the model by simulation, employing results of the real processes, i.e. reactors – either laboratory or large-scale, and proposal of optimal parameters of the model and of the operating conditions. Expected results of the project are contained in so proposed mathematical models of reactors directly applicable in design and engineering of the chosen advanced technologies. Also, these models can be the basis for development of software tools used to simulate and optimize the entire process and as the key to development of corresponding software support needed to manage these processes.

Project 125-1251963-1980

Optimization of copolymer properties using controlled radical polymerizations

Leader: Ante Jukić

Summary: Reactions and processes of radical polymerizations are fundamental and most applied technological procedures used in the production of polymer materials. Their advantages, in comparison with ionic or coordination polymerizations, include simple technical operation and production of polymer materials with balanced properties. However, with regard to their mechanism and kinetics, it is not possible to achieve, at the same time, a high reaction rate as well as a large molar mass of the formed polymer. Lately, the results of extensive research of controlled radical polymerizations have been published, like those initiated by nitroxide radicals, but new diperoxide initiators have exhibited the best applicative possibilities. These initiators, under adequate process conditions, yield higher rates of polymerization, shorter times of reaching complete monomer conversion, and large molar mass of the polymer with rather low polydispersity. However, these investigations have, until today, been focused mostly on homopolymeric systems. In the proposed research project, as a continuation of our previous work, comprehensive investigations of radical polymerizations with diperoxide initiators will be conducted with the aim of obtaining polymers of particular properties. The investigations will include the binary, ternary and graft copolymerizations of conventional monomers like styrene, methyl methacrylate, maleic anhydride, as well as polyolefines with functional monomers, mostly long-chain methacrylate esters and esters possessing polar groups like N-dimethylaminoethyl and tetrahydrofurfuryl methacrylates, as well as substituted maleimides, using the following diperoxy initiators: 2,5-dimethyl-2,5-di(ethylhexanoilperoxy) hexane and 1,1-di(tertbutylperoxy)-3,3,5-trimethyl cyclohexane. The application of kinetic models and the confirmed interdependence of process conditions and structure will enable the optimization of processes and desired properties of copolymers in complex systems. It is to be expected that the mentioned investigations will shed new light on the connection between polymerization reaction conditions with diperoxide initiators and structure of obtained copolymers. Also, results are expected in the production of new types of polymers with prestigious application properties, such as solution rheological properties, miscibility of polymeric mixtures and composites, and compatibility of biological and synthetic polymer materials.

Project 125-1251963-2573

Application of catalysis in environmental protection

Leader: Stanka Zrnčević

Summary: Catalysis plays an increasingly important role in providing realistic solutions to many environmental issues. For example, catalytic technologies help to protect the ozone layer, to combat the greenhouse effect, to create environmentally safer transport, to solve environmental problems of energy production, to purify exhaust of chemical, petrochemical and various other industries, to provide highest energy efficiency and minimize consumption of raw materials in the chemical, petrochemical and other industries, to process renewable raw materials, such as biomass, into valuable chemicals, etc. Thus, the use of catalysts can solve environmental problems, in areas such as emission abatement and environmentally benign synthesis. This provides a strong incentive for increasing our research efforts to provide the scientific and technological basis for advancement of process that make efficient use of energy and raw materials with minimal impact on the environment, and the abatement of pollutants from waste streams. For this purpose we shall use highly interdisciplinary approach which combines solid-state chemistry, physical chemistry and reaction engineering. Studies on the relationship between structural and chemical properties of solid materials and their catalytic properties will be at the origin of the design of a new catalyst. Catalyst characterization

and theoretical modeling will be applied to gain the information necessary for rationally guided catalyst design. Research in reaction engineering would be mainly concerned with the optimization of the interplay between chemical reaction and mass- and heat transfer in the catalytic system. Understanding the interplay of these elements would be crucial for the successful development of new or improved catalysts for pollution control and environmental cleanup processes. The measurement of catalytic activity consists in determining the rate of reaction (VOCs oxidation, NO_x reduction, low-temperature CO oxidation, wet air phenol oxidation, shoot oxidation); this is important and essential for either the fundamental purpose (such as understanding catalytic reaction mechanisms), or for the design purpose, from the screening of candidates for the scale-up towards the industrial application to the optimization of the catalytic process. The results will be published in national and international journals and presented at the conferences.

Project 125-1251963-2580

Advanced processes of hydrocarbon fuels desulfurization

Leader: Katica Sertić-Bionda

Summary: During the past three decades, the requirements on liquid hydrocarbon fuels, particularly gasoline and diesel fuels, were significantly increased due to increasing stringent environmental protection regulations. The most important task in production and application of these fuels is the reduction of environmentally harmful sulfur and nitrogen compounds as well as aromatic hydrocarbons, particularly benzene. Removal of sulfur and nitrogen containing compounds is usually achieved simultaneously by the so-called hydrodesulfurization process (HDS) at elevated temperatures and high hydrogen pressures using Co-Mo/Al₂O₃ catalysts. The HDS process is highly efficient in removing aliphatic sulfides, but less effective for thiophenes and its derivatives known as refractory sulfur compounds, which makes deep-desulfurization extremely difficult. In several recent reviews it was shown that it is difficult to use the existing hydrotreating technology for reducing sulfur content and achieving levels required for ultra clean liquid fuels. Advanced desulfurization processes include investigations of desulfurization methods aimed at lowering the sulfur content to less than 10 mg/kg, which is in line with EU regulations, and they can be divided into two groups: selective adsorption and liquid extraction. The overall objective of proposed scientific project is to develop new processes for efficient separation of the sulfur compounds from motor fuels by high-capacity selective adsorption on zeolites, activated carbon, metal and metal oxides, as well as by liquid extraction with selective solvents like sulfolane, furfural, etc. Efficiency of these processes will be explored in combination with the conventional HDS process. The research will be focused on the identification of the refractory sulfur compounds, selection of selective adsorbents and solvents, and optimization of parameters for these processes. Our work will also include the exploration of adsorbent and solvent regeneration processes. The further objective of the proposed project, as a continuation of previous research, is to establish the optimal process parameters of reforming, isomerization and catalytic cracking processes in order to minimize the aromatic hydrocarbon content in the corresponding fuels whilst retaining their application properties. By implementing chemical engineering principles to process modeling and control, it will be possible to combine application and environmental factors of hydrocarbon motor fuel production.

PROGRAM DESCRIPTION

Progress in industry and the nation's economic health rely on the continual discovery, development, and use of new materials. In order to ensure the economy growth the appropriate knowledge level in this particular area should be reached. Croatia has very active and scientifically excellent research groups in the area of advanced materials but due to weak coordinating actions, most of them are not involved in a real integrating and synergic collaboration. The aim of the proposed program is to create a core group of scientists whose skills cover all the competencies needed to lead the innovative and advanced research in the field of novel materials. The program links 6 projects combining excellence in different scientific areas including: chemistry, materials science and engineering, chemical engineering and biomedicine. We strongly believe that the program will enhance the research potential of all the partners due to both improved efficiency of intellectual work and extended available facilities. The experimental part of projects involves the preparation and characterization of novel materials, with a wide range of morphologies and with well-defined structures, relevant to applications such as tissue engineering, biosensors, catalysts, coatings as well as to the waste management and environment protection. The cohesive force of this program is the unique concept (integration of science and engineering methodology), starting from natural sciences, over engineering thermodynamics and kinetics and basic process knowledge, ending with the characterization of the property-tailored material. The concept is applied to: (1) investigation of novel routes to highly-porous hydroxyapatite ceramics, (2) the synthesis of ceramic nanocomposites and organic-inorganic hybrids by the sol-gel process, (3) preparation of nanocomposites based on polymer matrix and layered minerals, (4) investigation of water-based polymer solutions and hydrogels, (5) development of novel sensors for the determination of biologically important analytes, (6) development of environmentally sustainable cementitious materials. It is expected that the program will contribute to the better understanding of the synthesis, structure and properties of novel materials for various applications. The collected knowledge will be disseminated to the new generations of scientists and engineers, thus creating the basic presumptions for the overall progress of industry in the country.

>>

PROJECTS

Active projects on the program Novel materials with target properties (NOMACIS)

- | | |
|------------------|--|
| 125-1252970-3005 | Bioceramic, polymer and composite nanostructured materials
Leader: Hrvoje Ivanković
Institution: Faculty of Chemical Engineering and Technology |
| 011-1252970-2254 | Cement composites and stabilization of harmful wastes
Leader: Petar Krolo
Institution: Faculty of Chemistry and Technology, University of Split |
| 125-1252970-2981 | Sol-gel derived ceramic nanocomposites
Leader: Stanislav Kurajica
Institution: Faculty of Chemical Engineering and Technology |
| 125-1252970-2983 | Development of a hydration process model
Leader: Tomislav Matusinović
Institution: Faculty of Chemical Engineering and Technology |
| 011-1252970-2252 | Utilisation of fly ash in new inorganic binding materials
Leader: Jelica Zelić
Institution: Faculty of Chemistry and Technology, University of Split |

Note:

All the projects on the program belong to the Technical Sciences, Chemical Engineering field.

Project 125-1252970-3005

Bioceramic, polymer and composite nanostructured materials

Leader: Hrvoje Ivanković

Summary: Since the beginning of civilization, materials have played a key role in the growth, prosperity, security, and quality of human life. Advances in materials have preceded almost every major technological leap and are crucial to the continued vitality of industry. Some of today's most exciting and groundbreaking science is focused on nanomaterials and biomaterials. Any material that is composed of structural elements (such as grains or crystallites) having sizes from 1 to 100 nm across, or layers of that thickness is considered as nanostructured material. These ultrafine microstructures are known to exhibit novel and technologically attractive properties. The main mission of our project is to develop and to test novel nanostructured materials relevant to applications such as tissue engineering, drug delivery, biosensors, highly-functionalized heterogeneous catalysts and coatings. The project tasks will be realized according to the newest research trends, in four thematic groups, within which the following problems are specified: (1) investigation of novel routes to highly-porous hydroxyapatite ceramics to prepare inorganic-organic scaffolds (based on bioactive hydroxyapatite and biodegradable polymers) as well as hydroxyapatite-supported heterogeneous catalysts; (2) the design and characterization of new sol-gel hybrids for special coatings and scaffolds and the development of key structure-function correlation; (3) preparation and characterization of nanocomposites based on polymer matrix and organically modified natural and synthetic layered minerals; (4) investigation of miscibility and interactions in multicomponent water-based polymer solutions and hydrogels. The research within every subpart of the project will be organized according to the unique scheme: hypothesis, model, measurements, characterization, adjustment of the model to obtain the compatibility with experimental data, the change (optimization) of process parameters, desired process/material/properties. The successful realization of this project will result in the increase of the educational and scientific level in the field of materials science and engineering within this group. The collected knowledge will be disseminated to the new generations of engineers, thus creating the basic presumptions for the overall progress of industry in the country.

Project 125-1252970-2981

Sol-gel derived ceramic nanocomposites

Leader: Stanislav Kurajica

Summary: Three classes of sol-gel derived innovative materials are studied: (1) ceramic nanocomposites based on mullite ($\text{Al}^{\text{VI}}_2[\text{Al}^{\text{IV}}_{2+2x}\text{Si}_{2-2x}\text{O}_{10-x}]$), combined with zinc or lanthanum compounds; (2) gahnite (ZnAl_2O_4) nanocrystalline ceramics; (3) calcium aluminate (CaAl_2O_4) doped with europium. Ceramic nanocomposites and nanocrystalline materials show vastly different thermal, electrical, mechanical and optical properties compared to their microcrystalline counterparts, making them the attractive area of investigation. The elaboration of these innovative materials, in order to achieve controlled structural and microstructural characteristics, requires integrated research strategy on designing, synthesis, thermal treatment, structural investigation and kinetic characterization. The project is comprised of the sol-gel processes optimization, involving stoichiometry control and process conditions, gel drying and aging as well as the thermal treatment in order to achieve crystallization of aimed phases, microstructure and properties. The pathways of crystallization processes, structures and microstructures of the products, kinetic parameters of the crystallization processes, sintering or deposition on substrate, processing and properties of interest are studied as well. Special attention is paid to the influence of introduced heterogeneities on thermal evolution of gels and the crystallization path. The expected results are the optimized and reproducible processes and defined thermal treatment regimes yielding ceramic products with controlled phase composition and microstructure and known kinetic parameters of the crystallization process. The obtained materials are predicted to be attractive in the field of heterogeneous catalysis, flat panel displays, ceramic tile glazes and luminescence materials.

Project 125-1252970-2983

Development of a hydration process model

Leader: Tomislav Matusinović

Summary: Although the hydration process of calcium aluminate cement (CAC) represents a process of industrial and commercial importance, the chemical reactions involved during the hydration are not yet well understood. The knowledge achieved through the years of scientific investigation of rapid setting and hardening CAC, the knowledge about its phase composition, relations between structure and properties as well as reactivity and knowledge about process control will enable competent study of the hydration process. The main goal of research is the development of a hydration process model, development of new method of continuous determination of isothermal heat of hydration and thermal properties of cement materials, development of linear correlation between macroscopic properties of cement materials and parameters of ultrasonic signals as results of interaction of ultrasonic waves and microstructure and in situ conducting of experimental research of CAC production process. The artificial intelligence methods, specifically neural networks, will be used in the course of creating of the model for process control study and development of the improved control method.

PROGRAM DESCRIPTION

Multifunctional polymer systems are the materials of the future with highly improved or completely new properties, not exerted by standard materials. Application of such multifunctional polymer systems has a big potential scientific, technological and economical importance. The goal of the program is to study and produce new environmentally and economically acceptable materials with multifunctional properties and improved durability. The common hypothesis of the program is the modification and characterization of the surfaces in multifunctional polymer systems using different methods of surface treatment and different additives (plastomers, elastomers, bitumen, micro- or nanofillers, compatibilizers, enzymes, stabilizers, biodegradable components), which results in new properties due to better interactions and synergism of the components. Molecular modeling and simulation of the structure and material surface properties, permeation mechanisms, hardening, ageing and durability gives the opportunity to obtain the theoretical predictions as complement to experimental study. Development of the modification processes, preparing and compatibilization of the multifunctional polymer materials will result in homogeneous morphology, which is the condition for achieving effective adhesion and improved and/or new properties. Interdisciplinarity as well as knowledge from different scientific areas (technical, biotechnical and natural sciences) and scientific fields (chemical engineering, materials, textile technology, food technology, graphical technology, ecology and physics) will achieve the goal of the program. The originality and interdisciplinarity will lead to the development and broadening of the knowledge on multifunctional polymer systems and their production technologies. Such polymer systems will be then used in the economy of the Republic of Croatia in accordance with the recommendations of the European Union. The final goal is to gather the team of the researchers and engineers, which will have all needed knowledge and skills in analytical and experimental methods in order to achieve world-wide level of technology in the scientific field of materials. This will enable education of young researchers, which will be capable to achieve all program goals and high demands in the study of polymer systems. The recognizability of scientific team will be achieved also by publishing of scientific papers in international journals.



PROJECTS

Active projects on the program Surface modification in multifunctional polymer systems

- 058-1252971-2805 Permeation properties of some polymer materials for food packaging
Leader: Kata Galić
Scientific field: Biotechnical Sciences / Food Technology
Institution: Faculty of Food Technology and Biotechnology, University of Zagreb
- 117-1252971-1367 Interfacial phenomena of active multifunctional textile materials
Leader: Anamarija Grancarić
Scientific field: Technical Sciences / Textile Technology
Institution: Faculty of Textile Engineering, University of Zagreb
- 125-1252971-3033 Development of innovative multifunctional polymer blends
Leader: Jasenka Jelenčić
Scientific field: Technical Sciences / Chemical Engineering
Institution: Faculty of Chemical Engineering and Technology
- 011-1252971- 2249 Polymer blends with biodegradable components
Leader: Tonka Kovačić
Scientific field: Technical Sciences / Chemical Engineering
Institution: Faculty of Chemistry and Technology, University of Split
- 125-1252971-2575 Surface and interface engineering of nanoparticles in adhesive nanomaterials
Leader: Mirela Leskovac
Scientific field: Technical Sciences / Chemical Engineering
Institution: Faculty of Chemical Engineering and Technology
- 125-1252971-2578 Modification and stability of multiphase polymer systems
Leader: Vesna Rek
Scientific field: Technical Sciences / Chemical Engineering
Institution: Faculty of Chemical Engineering and Technology
- 192-1252971-1982 Investigation of polymer ageing and prediction of life cycle of materials
Leader: Muhamed Sućeska
Scientific field: Technical Sciences / Chemical Engineering
Institution: Brodarski institute d.o.o., Zagreb
- 125-1252971-2868 Vibrational dynamics and structure of multifunctional polymer materials
Leader: Vesna Volovšek
Scientific field: Natural Sciences / Physics
Institution: Faculty of Chemical Engineering and Technology

Project 125-1252971-3033

Development of innovative multifunctional polymer blends

Leader: Jasenka Jelenčić

Summary: In the next ten years, the scientific development in the field of polymer blends and nanocomposites will influence many different industrial branches. This project studies the properties, processing and development of current polymer materials with the aim to create innovative ones. It is aimed to overcome the weakness of the polymer blends and/or nanocomposites due to their immiscibility. The problem of immiscibility is often overcome with the addition of a proper compatibilizer (block/graft copolymer or by interfacial chemical bonding with coupling agent) that is able to establish molecular interactions and to modify the interfacial conditions. The compatibilizer is then located at the interface, it acts as emulsifier and reduces the interfacial tension. The improved properties of polymer materials can be achieved using this compatibilization technique, which results in enhancement of the impact strength, processability, tensile strength, chemical resistance and barrier properties. A new class of nanocomposite materials is formed by addition of minor amounts of fillers, that have characteristic dimensions in the nanometer length scale, to polymer blend matrix-based materials. The properties of the nanocomposites are strongly influenced by the nature of the filler/matrix interface. The examination of the morphology and interface adhesion will be carried out using experimental methods like SEM, DMA, DSC and FTIR. More recently, polymer blending has also been employed to enable the reuse and recycling of industrial and/or municipal plastics waste. Recycling of used plastics is an issue of great importance for a sustainable society. The post-consumer plastics recycling industry started as a result of environmental pressure to improve waste management. The recycling of post-consumer plastics (PET, LDPE, LLDPE and HDPE) is strongly increased in the past two decades due to rapid growth of their application. The effort to reduce, reuse and recycle post-consumer plastics has become challenging task to avoid adverse environmental impact as well as to restrict the raw material consumption. The objective of the project is to understand, design and develop new multifunctional polymer blends and/or nanocomposites in order to extend their limits in a context of sustainability. The project will be a significant step forward to develop innovative materials and transfer the knowledge into related industries.

Project 125-1252971-2575

Surface and interface engineering of nanoparticles in adhesive nanomaterials

Leader: Mirela Leskovic

Summary: Nanocomposites represent the materials for the future because of their significantly improved and/or new properties due to the realized interactions at nanolevel. Our previous results imply the necessity of profound knowledge on the subject, by following the idea about direct correlation between interface and final technical properties of nanomaterials. Project hypothesis is that the controlled modification of inorganic nanoparticles will change the chemical, physical and energetic properties of the surface. In this way it is possible to influence the interface between the nanoparticles and polymer matrix by increasing the interactions and optimizing the adhesion phenomena. This will lead to the improved and/or new multifunctional properties of nanomaterials, i.e. the simultaneous increase of the opposite properties such as strength and elasticity and/or toughness that is not usual in standard materials. The objectives of investigation are the controlled modification of the interface structure and properties in polyurethane (PU) and other nanocomposites. In this project, by modification of nanoparticles, such as amorphous precipitated and/or fumed silica or natural silica (diatomite), the surface functionalization and changes of the surface energy will be achieved. Surface modification of nanoparticles will be done with different procedures, like silanization, irradiation grafting and/or in situ addition polymerization in a presence of monomer. Specific objectives of the project are the new in situ procedures of nanocomposite preparation in a presence of modified filler in order to solve the problem of nanoparticles agglomeration that limit wider commercial application of nanomaterials. The obtained morphology, mechanical, thermal and stability properties will be correlated with the structure and properties of interface in nanocomposites. For the surface investigation of modified fillers and interface in composites, the advanced analytical methods and molecular modeling will be applied. The expected results of the project will be the new nanomaterials with the significantly improved and/or multifunctional properties. Optimized formulations and prototypes of the adhesive products, i.e. constructive adhesives and sealants might be a step forward in demanded applications of nanomaterials.

Project 125-1252971-2578

Modification and stability of multiphase polymer systems

Leader: Vesna Rek

Summary: The development of the multicomponent polymer systems, polymer blends, PM, and polymer modified bitumens, PMB, is considered as one of the most important developments in the new engineering materials area. Mixing of plastomers, P, of various degree of crystallinity and polarity with thermoplastic elastomers, TPE, and bitumen, BIT, results in the final morphological structure, which depend on blend processing conditions, phase composition and phase content; the mixing modifies the interfacial layer and engineering properties of these materials that are crucial for the application in constructions. The synergistic behavior of particular PM and PMB blend components can not be achieved without understanding the relationship between the PM and PMB composition, morphological structure, phase interactions and interfacial layer properties, which influence thermal, rheological properties and blend stability (the hypothesis). The project will include systematic investigation of new multiphase systems, ternary PM and PMB. PM blends studied will include olefinic plastomers, olefinic/styrenic plastomers and olefinic plastomers/TPE polyurethane, with and without compatibilizers added. The polymer and BIT blends, prepared with olefinic P, olefinic P blends, P waste and TPE block copolymers as modifiers will be investigated. The goal is to establish the influence of the PM and PMB composition, structure of the block copolymers and other TPEs used as compatibilizers and BIT polymer modifiers and the processing conditions on the morphological structure of the blends, size and shape of dispersed phase, phase interactions and distribution of particular compatibilizer blocks and modifiers on the phase and domain surface in matrix. The further goal is to establish the influence of surface modification and PM and PMB morphological structure on rheological properties in processing and use as well as on the stress stability, and verification of the morphological and rheological data by fractal analysis. The degradation stability and wear resistance. The waste recycling. Expected result is the new knowledge about the relationship between morphological structure and phase composition, phase type and phase content and their influence on the properties of investigated systems. The results will be tested through scientific publications, education and application in the industry. The importance of investigation is the possibility of creating PM and PMB with desired structural and engineering properties.

Project 125-1252971-2868

Vibrational dynamics and structure of multifunctional polymer materials

Leader: Vesna Volovšek

Summary: The development of new polymer materials is based on the implementation of nanoparticles into the polymer matrix. Addition of anorganic components leads to the improvement of various physical and mechanical properties. These improvements are the result of complex interactions between polymer, filler and interlayer. The functionality and intrinsic properties of the materials obtained in this way, are significantly influenced by spatial dispersion of nanoparticles in the matrix and the type and character of bonding in the polymer-nanofiller interlayer. In our research we are going to determine the structure and dynamics of multifunctional polymer materials by combining experimental and theoretical approach. Experimental basis consists of vibrational spectroscopies, Raman and infrared. These methods are important for the analysis of polymer nanocomposites, because they provide information on the molecular level. Vibrational spectra would be analyzed by vibrational dynamics calculation of a free macromolecule and its subunits. Valent field, potential energy scans, various molecular geometry conformations, vibrational frequencies, infrared vibrational band intensities as well as Raman activities would be calculated by DFT (Density Functional Theory) method using B3LYP functional and 6-31 G(d,p) basis functions set. This method turned out to be successful in the analysis of organosilical compounds. The calculation would enable us to make a reliable assignment of characteristic bands of particular atomic groups and the characterization of interactions in the nanoparticle-polymer interface. As the materials' physical properties are changing under the influence of external parameters (temperature, pressure, stress, aging, additives proportion, etc.), the recognition of characteristic bands as well as monitoring of the changes in the vibrational spectra would enable us to understand the observed behavior of complex composite and nanocomposite materials on the molecular level. Special attention would be paid to the research of low-frequency part of the vibrational spectrum, which could provide the information about partial ordering of these complex systems (Bose band). By measuring the dichroic ratio from the polarized infrared spectra, the orientation of particular segments in thin polymer films, undergoing uniaxial stress, would be determined. Obtained data would be compared with the measurements of mechanical properties. The polymer and composite materials are also interesting from the aspect of optical and electrical properties. By using the methods and models of nonlinear physics, the sensitivity of high-intensity directional emission from polymer lasers will be investigated.

PROGRAM DESCRIPTION

Water is one of the most important natural resources and without it the life on the Earth would be impossible. One of the priorities in the environmental protection is preserving of clean water as a part of water management. Hypothesis: The main goal of the program is research and development of the new and efficient technologies for wastewater treatment which enable the preservation and improvement of water quality based on concepts of sustainable development. The initial task is to identify and define all important aspects of the interaction between water and environment by the coordinated work of interdisciplinary team. It is followed by the individual confirmations of hypothesis by investigations of treatment processes of drinking, industrial and ballast water. It is expected that hypothesis about the application of new technologies for the efficient treatment of specific types of water in Croatia will be experimentally confirmed and developed. Also, removal of certain contaminants, economical aspects of proposed technologies and their impact on the environment by permanent control of ecological parameters will be considered. Development of advanced oxidation technologies for the degradation of toxic and hardly biodegradable compounds as well as inactivation of living organisms, and experimental tests on the laboratory and pilot plant scales will offer particular solutions for: minimization of organic content, increasing of biodegradability and separation of arsenic from drinking water; degradation of herbicides, tensides, dyes and phenols from industrial waters; removal of allochthonous organisms from ballast water in combination with mechanical separation methods. Integration of ion exchange methods in the production systems of synthetic fertilizers, dyes and galvanization will enable recirculation of water and reuse of raw materials from concentrate eluates. The main goal could be achieved only by the interdisciplinary cooperation of scientists from the fields of chemistry, biology, chemical engineering, environmental engineering and mechanical engineering gathered in the 4 Projects (11 Labs). Due to the wide dimension and significance of the program, inter-regional cooperation of 2 faculties of the University of Zagreb and 1 department of the University of Dubrovnik is inevitable. Results of investigation will contribute to the preservation of the environment and natural water resources which gives specific priority to the program due to the orientation of Croatia towards tourism and the importance of Adriatic.



PROJECTS

Active projects on the program Development of advanced technologies for water treatment

- 125-1253092-3004 Ion exchange processes in industrial water quality system
Leader: Štefica Cerjan-Stefanović
Scientific field: Technical Sciences / Chemical Engineering
Institution: Faculty of Chemical Engineering and Technology
- 125-1253092-1981 Wastewater treatment by advanced oxidation technologies
Leader: Natalija Koprivanac
Scientific field: Technical Sciences / Chemical Engineering
Institution: Faculty of Chemical Engineering and Technology
- 120-1253092-3021 Environmental acceptability and efficiency of modern water treatment processes
Leader: Nikola Ružinski
Scientific field: Technical Sciences / Ecoengineering
Institution: Faculty of Mechanical Engineering and Naval Architecture, University of Zagreb

Project 125-1253092-3004 Ion exchange processes in industrial water quality system

Leader: Štefica Cerjan-Stefanović

Summary: Water management must take into account the optimal use of water as a raw material. This is possible by separation of pollutants with ion exchangers and with other state-of-the-art and classical purification processes. The selective ion exchangers are able to purify as much as 70 % of water. So purified water can be re-used in the process or released into the naturally occurring recipients. Concentrated solutions obtained by the recovery of ion exchangers (the ions of zinc, arsenic, chrome, phosphorus and flour) or the concentrates are re-used in the process as raw materials. Binding preferences of ion exchangers can be determined only experimentally, because the separation mechanisms depend on many properties of water from the respective production process. The water in fertilizers production, zinc-plating and dyeing have a marked non-uniform composition during production which causes operational shocks in the ion exchange column. Water segment at the ion exchange port system and the leachate will be analyzed during ion exchange. This will unload the ion exchanger which comes in contact with the aggressive influent. In parallel with synthetic resins (HP-555, HP-441, Amberlit IRA 93 SP, Lewatit S 4426, Amberlit Cg-400 and Dowex 1x8) the zeolite exchange capacity, binding rate and the breakthrough curves will be analyzed. Chromatography will be performed with the ion chromatographic system DX600, supplied with the electrochemical detector ED50 and AS19 column. The reason for selecting AS19 is in its special design for the analysis of oxihalide and anions in potable ground, sea and waste waters and in other similar samples. The KOH solution will be the mobile phase. The selected model will be tested for the applicability on two series of anions. The first one will comprise fluoride, chlorite, chloride, chlorate, nitrate and sulfate. The other one will comprise formate, bromate, nitrite, bromide, carbonate and phosphate ions. This scientific approach will be applied in the selectivity modeling by neuronic networks and genetic algorithms for the control and management of pilot plants. The procedure will enable re-use of process water and prevention of hazardous waste generation (zinc-, chrome-, arsenic-, fluorine- and phosphorus-based precipitates). The principle of water re-use in galvanization, fertilizers production and use of organic dyes will become a model for process water treatment in other industries as well.

Project 125-1253092-1981 Wastewater treatment by advanced oxidation technologies

Leader: Natalija Koprivanac

Summary: Water is important natural resource for sustainable ecosystems, human life and economical development. Preserving of clean water demands minimization of water consumption, reduction of the amount of wastewater and decrease of wastewater loading. Management of technological wastewater includes interdisciplinary and multidisciplinary approach and adjustment with increasingly more rigorous legislation. Organic pollutants in wastewater present a specific problem due to their toxicity, bioaccumulation and poor biodegradability. The scope of the project is to search and identify the possibilities offered by Advanced Oxidation Technologies (AOT) as destructive methods for treatment of wastewater loaded with different recalcitrant organic pollutants. They distinguish from conventional technologies as being low and wasteless technologies for the treatment of wastewater while the need for secondary treatment is minimized. The study will be performed on model wastewater containing certain types of organic dyes, herbicides, surfactants and intermediates of organic chemical industry. The suitability of Advanced Oxidation Processes (AOPs): chemical, photochemical, catalytic, photocatalytic and processes involving high voltage electrical discharge will be studied. Influence of solid particles, different types of zeolites, on all applied processes will be investigated. The satisfactory level of degradation extent of organic pollutants and/or promotion of their biodegradability is expected. The efficiency of AOPs will be estimated on the basis of ecological parameters prior and after the treatment of wastewater as well as

on the amount and type of degradation products formed. On the basis of obtained optimal results for each of the processes, taking into account the process parameters and the type of pollutants, the most acceptable process will be chosen. The investigation of reaction chemistry and process kinetics by using modern analytical methods will be a basis for the development of mathematical models which will offer the possibility of behavior prediction for the investigated systems on the real scale. The implementation of advanced oxidation technologies for solving the problems of wastewater loaded with organic pollutants is compatible with the principles of sustainable development and long and short-term strategic research objectives in Croatia. The results of this project could be an excellent basis for the design of wastewater treatment pilot plants for wastewater loaded with different organic pollutants.

PROGRAM

MODIFICATION AND IMPROVEMENT OF METAL SURFACES

INSTITUTION

Faculty of Chemical Engineering and Technology

LEADER

Emma Stupnišek Lisac

PROGRAM DESCRIPTION

Material science and engineering are considered as fundamental sciences because the results of the research of materials are transferred to other fields of science and technology (electronics, chemical technology, mechanical engineering, aeronautics, naval architecture, civil engineering, medicine etc.) and lead to the development of new products with better properties. The finite resources of raw materials for obtaining metals and increasing pollution bring out a new problem for scientists: development and application of more durable materials. Surface engineering, as a new scientific and professional discipline, is developing intensively because of its big influence on the durability, reliability and cost effectiveness of structural elements in many technical disciplines. New procedures for surface modification and coating which accomplish excellent tribological and chemical properties of metal surfaces are being developed. The program Modification and improvement of metal surfaces is a continuation of the collaborative project within the University of Zagreb (KP 0125007), accepted by the Ministry of Science, Education and Sports in 2003. Encouraged by the positive results, the associates have decided to continue the collaboration within a new program. Associates from the project from the University of Split have joined the program. Their scientific work, according to the field of the research and the methods, is close to the research conducted within the projects on the Faculty of Chemical Engineering and Technology. The common aim of all of these projects is to obtain metals that are more resistant in the conditions of use by modification of their surface. Results of the investigation will show how efficient is the applied protection of very important structural metals (steel, copper, aluminum and their alloys) in conditions of their application. It is important to point out that the research is based on ecologically acceptable compounds and techniques. The measurements will be done with modern electrochemical methods (polarization techniques, electrochemical impedance spectroscopy), quartz-crystal nanobalance, as well as spectroscopic methods (SEM, EDS, AFM and Raman). The importance of the proposed research is in obtaining more stable, reliable and low-cost materials, which will result in saving raw materials and energy, protecting the environment, as well as in preserving the cultural heritage.



PROJECTS

Active projects on the program Modification and improvement of metal surfaces

- 125-1252973-2572 New non-toxic metal corrosion inhibitors
Leader: Ema Stupnišek Lisac
Scientific field: Technical Sciences / Chemical Engineering
Institution: Faculty of Chemical Engineering and Technology
- 125-1252973-2576 Fundamental and applied research of conducting polymers
Leader: Zoran Mandić
Scientific field: Technical Sciences / Chemical Engineering
Institution: Faculty of Chemical Engineering and Technology
- 011-1252973-2243 Electrochemical processes at phase boundary and physical properties of surfaces - ELGRAFAIII
Leader: Jagoda Radošević
Scientific field: Technical Sciences / Chemical Engineering
Institution: Faculty of Chemistry and Technology, University of Split
- 120-1252973-1814 Diffusion modification of steels by carbide layers
Leader: Mladen Stupnišek
Scientific field: Technical Sciences / Mechanical Engineering
Institution: Faculty of Mechanical Engineering and Naval Architecture, University of Zagreb

Project 125-1252973-2572
New non-toxic metal corrosion inhibitors

Leader: Ema Stupnišek Lisac

Summary: Corrosion is a process of unintentional destruction of structural materials (caused by physical, chemical and biological factors), which is responsible for the loss of 1 % of the gross national product of a particular national economy. According to this, it is of great significance to develop methods and techniques to reduce this process. Among other techniques for the corrosion protection, the use of corrosion inhibitors takes a special place because of their specific protection as well as their expanded application. (1) The aim of this project is the development of new, efficient and ecologically acceptable corrosion inhibitors. Our previous investigations on the influence of the composition and the structure of molecules on the protective properties of a heterocyclic organic compound have shown that it is possible to design molecule of an organic compound with good inhibiting characteristics. New synthesized imidazole derivatives with a phenyl group have shown good inhibiting properties. The synthesis procedure of these compounds, as well as their inhibiting properties, are under the procedure of obtaining patent right /DZIV num. 757(P-442)/. Results of our research carried out on project 0125012 have shown that the imidazole derivatives are good inhibitors for the atmospheric corrosion of copper as well as for the copper corrosion in inorganic acid solutions and in the sea water. On the basis of our former knowledge, the modification of imidazole molecule will be continued by introducing new substituents and testing of new corrosion inhibitors efficiency for copper and other metals in aggressive media. (2) The preliminary investigation of the efficiency of these inhibitors in protection of bronze patina which were carried out under the international project "ECO-NET" (collaboration of researchers from France, Croatia and Romania), have shown the possibility of efficient protection of patinated bronze sculptures exposed to the conditions of polluted urban atmosphere (acid rain). The investigation will be carried out first on a bronze with a composition similar to archaeological bronze, patinated with an artificial patina obtained by an electrochemical procedure, and then on samples of archaeological bronze. The investigation will be carried out by the most modern electrochemical methods (polarization techniques, electrochemical impedance spectroscopy), quartz-cristal nano balance, as well as by the spectroscopic methods (SEM, EDX, AFM and Raman). The proposed work is important for several reasons: a) protection of copper against atmospheric corrosion in electronic industry, b) reduction of metals dissolution in industrial acid descaling processes, c) protection of copper from corrosion in sea water, d) protection of cultural heritage.

Project 125-1252973-2576

Fundamental and applied research of conducting polymers

Leader: Zoran Mandić

Summary: Electrically conducting polymers belong to an important class of macromolecular materials from the chemical, physical and material engineering viewpoint. The considerable variety of structures and physico-chemical properties of conducting polymers make them attractive materials for a number of applications. The aim of this project is to reveal the fundamental structure-property relationship of conducting polymers with the specific targets in the applications in electrochemical power sources, corrosion protection, electrocatalysis and drug delivery. The research focus will be centered mostly on the morphology of resulting polymer layers, surface density and availability of active centers, porosity and compactness, charge transfer and charge transport mechanism, capacitance, oxidation/reduction switching rate and adhesion properties. Due to its excellent characteristics, such as great stability and a high number of oxidation and protonation states, special attention will be paid to polyaniline and its derivatives. Chemical aspects of the project will be focused on the electrochemical synthesis of conducting polymer layers with favorable properties for specific applications. Spectroscopic, microscopic and electrochemical techniques will be used for property determinations and structural investigations. It is expected that the study of relationships between structure of conducting polymers and their properties will considerably improve the understanding and fundamental knowledge of the chemistry, physics and engineering of this type of materials, and to open new or enhance existing possibilities of their application in science, technology and medicine.

PROGRAM DESCRIPTION

Appplied scientific research in the field of water purification technologies can offer improved solutions, especially in the development and application of novel membrane technologies, biological water treatment, or stabilization of water in the large water supply systems. Numerous problems are related to the treatment and disposal of the waste products resulting from such water purification technologies including the sludge and other waste residuals which may contain arsenic, pharmaceuticals and other toxic substances. There is also a need for sensitive analytical methods for the evaluation of parameters related to the monitoring of environmental quality. We propose a research programme which is addressing above mentioned problems in three separate projects: (1) Water purification and stabilization in large water supply systems; project leader Laszlo Sipos, (2) Membrane and adsorption methods for removal of organic substances in water treatment procedures; project leader Krešimir Košutić; and (3) Development of advanced analytical methods for determination of pharmaceuticals in the environment; project leader Sandra Babić. The research focus is in the development and application of membrane technologies for drinking water production, and in the development of more efficient chemical and/or biological treatments preceding membrane filtration. The research will be conducted using laboratory-based and pilot-plant experimental techniques and includes methods for removal of organic compounds, iron, manganese, and ammonia, and especially arsenic. New methods for correction of carbonate stability in drinking water based on membrane technologies and electrodialysis will be proposed. In addition, the novel types of chemical sensors and remote stations for water quality monitoring will be applied. The waste products will be characterized, including arsenic containing wastewater and the retentate of membrane technologies (RO, NF and UF). Development of analytical methods for the determination of trace organic compounds, mainly pharmaceuticals in the environment, as well as the elemental analysis using ICP-MS method are proposed. This research programme is expected to offer real solutions for treatment of water and sludge of large water supply systems in Eastern Slavonia and karst water sources in coastal and island regions of Croatia. Also, the development of novel advanced analytical methods for detection and identification of waste compounds in environmental samples is proposed.

>>

PROJECTS

Active projects on the program Advanced water treatment and analysis

- 125-1253008-1350 Advanced analytical methods for pharmaceuticals determination in the environment
Leader: Sandra Babić
Scientific field: Natural Sciences / Chemistry
- 125-1253008-3009 Membrane and adsorption processes for organics removal in water treatment
Leader: Krešimir Košutić
Scientific field: Technical Sciences / Chemical Engineering
- 125-1253008-2571 Water purification and stabilization in large water supply systems
Leader: Laszlo Sipos
Scientific field: Technical Sciences / Chemical Engineering

Note:

All the projects on the program are being performed at the Faculty of Chemical Engineering and Technology.

Project 125-1253008-1350

Advanced analytical methods for pharmaceuticals determination in the environment

Leader: Sandra Babić

Summary: Pharmaceuticals are continuously being released in the environment as a result of manufacturing processes, the disposal of unused pharmaceutical products, and the excreta. Recently, pharmaceuticals have emerged as an environmental problem and a lack of knowledge concerning this kind of pollution requires further investigation. Their characteristic is that they do not need to persist in the environment to cause negative effects, since they are continuously introduced into environment. Moreover, high water solubility and poor degradability of some of these compounds enable their penetration through all natural filters and constructed treatment facilities, thus putting drinking water supply systems under the risk. Their incomplete removal from the wastewater treatment plants (WWTPs) is referred to as the major source of their release into environment. The fact that these compounds are not in the regulatory list of environmental pollutants resulted in comparatively little attention paid to them. Because of that, the analytical methodology for their determination in complex matrices (wastewater, especially sediment) is still evolving. Project objective is to improve existing analytical methods and develop new, more sensitive and efficient protocols for pharmaceuticals determination in wastewater and sediment. Emphasis will be on the development of robust multicomponent analytical methods, based on solid-phase extraction for water samples and microwave or ultrasonic extraction for sediment, followed by liquid chromatography coupled with different detectors (FL, DAD, MS). This approach will enable analyte isolation from the complex matrix, improve analytical performance and reduce contamination because the hazardous solvents are used in markedly smaller volumes. The results will be verified by the usual quality assessment procedures of the measuring system, in the first place by method validation. Accuracy of the method will be determined with reference materials and synthetic samples. In addition to this internal quality assessment, the results will be additionally validated by their publishing in international journals and at scientific events. The value of the research is in the application of the optimized and validated methods in the detection of pharmaceuticals in wastewater and sediment. The obtained information may serve to obtain occurrence and risk assessment data and to optimize WWTPs so that the emission of undesired pollutants into the receiving waters is prevented.

Project 125-1253008-3009

Membrane and adsorption processes for organics removal in water treatment

Leader: Krešimir Košutić

Summary: The intensive research, development and application of membrane technologies in the last decade resulted in their high efficiency and ecological acceptability. Therefore, they are labeled the most promising water treatment technologies for the 21st century. The international membrane market is forecast to grow more than 54 % over the next 5 years. Membrane technologies have also been used for last ten years in Croatia for desalination of brackish water on Lastovo and Mljet (and very soon on Dugi otok). They have been also used for the fluid separations in industry, and purification of potable water in continental Croatia is also planned. Recently, membrane processes gain attraction due to the efficient removal of organic substances and especially the emerging organic micropollutants, like pesticides, disinfection by-products, antibiotics, solvents, etc. from natural waters and wastewaters. Thus, the membrane processes as the part of the overall care of water resources become more important. The main research aim is to elucidate and better understand the mechanisms of organic pollutants rejection by selected reverse osmosis and nanofiltration membranes of various skin porosities. This will be done by studying mutual interactions among membrane material and solute under specific operational conditions. The examination of membranes' morphological features, primarily porosities of the active membrane layer will enable the estimation of membrane separation properties and the characterization of new low-energy

RO/NF membranes. The membranes' effectiveness for removal of typical organic pollutants will be investigated under the optimal operational conditions. Based on these results the solute rejection mechanisms in the examined systems will be established. RO/NF separation processes for organics removal will be applied in treatment of real waters, either natural ones or industrial process and waste waters. Structural and chemical properties of natural and synthetic aluminosilicates intended for the specific industrial wastewater treatments will be examined. Possibilities of the combined use of membrane processes, microfiltration and reverse osmosis, with organics adsorption will be investigated.

Project 125-1253008-2571

Water purification and stabilization in large water supply systems

Leader: Laszlo Sipos

Summary: Applied scientific research in the field of water purification technologies can offer improved solutions, especially in the development and application of novel membrane technologies, in development of new chemical and/or biological water treatment processes, in improving stabilization of water in the large water supply systems, in characterization and treatment of waste by-products resulting from such treatments, and in development of appropriate analytical methods and techniques for process and environmental monitoring. The research will be focused on development and application of more efficient chemical and/or biological treatments preceding membrane filtration and will be conducted using laboratory-based and pilot-plant experimental techniques. Novel methods for removal of organic compounds, iron, manganese, and ammonia, and especially arsenic will be developed, with an aim of removing arsenic down to the 10 µg/L concentration level. New methods for correction of carbonate stability will be proposed. In addition, the development and application of novel types of chemical sensors and remote stations for water quality monitoring for targeted purposes are proposed. The waste products will be characterized, including arsenic containing sludge from water treatment plants, and the retentate waste resulting from application of membrane technologies (RO, NF and UF). Development of novel methods for multielemental analysis using ICP- MS is proposed. This research project is expected to offer real solutions for treatment of water and sludge of large ground water supply systems in Eastern Slavonia, and the karst water sources in coastal region of Croatia.

PROGRAM DESCRIPTION

The purpose of the Program is to bring together projects related to molecular-genetics research of malignant tumors and to integrate and rationalize similar research with the following aims: (1) to improve quality of basic scientific research in the field of molecular oncology by applying the up-to-date methods and equipment necessary for realization of the projects (to ensure research quality at the highest world-level); (2) to develop and strengthen targeted research with the aim of obtaining new findings in diagnostics and treatment of the affected subjects; (3) development of molecular diagnostics (pre-symptomatic and post-symptomatic) and molecularly targeted treatment in the Republic of Croatia. General goal is to cast light on the molecular-genetics background giving rise to the occurrence of inherited and acquired human tumors and to propose new diagnostic and therapeutic procedures with as much as possible precisely defined long-term prognostic factors indicative of the disease in its early diagnosis. Altogether, these goals are directed towards efficient treatment of the disease and better prognosis. It is intended to be accomplished by: (1) research into structural changes in genes that will be followed by global transcriptomic and proteomic studies; (2) studies into new therapeutic procedures; (3) studies into molecular-genetics background underlying tumor occurrence with targeted in vitro experiments. This programme will be realized by the mean of the most sophisticated equipment that can be applied for this kind of research, including bioinformatics analyses in order to get the final results of global transcriptomics/proteomics analyses. The global genome analyses, as well as its activity analyses, are in common to the highest proportion of the projects included in this program. They are the most expansive and methodologically demanding. Finally, their availability justifies the title of this program and, for all these reasons, will be described in details. Significant progress is expected in elucidation of molecular events underlying development and progression of malignant and related diseases, establishment of new diagnostic approaches based on characterization of new, early markers of malignant tumors employing methods in functional genomics and proteomics and design of new treatment strategies (molecular and conventional).

>>

PROJECTS

Active projects of the Faculty of Chemical Engineering and Technology within the program Integrative genomics and proteomics in cancer research

125-0982464-1356 New heterocycles as antitumor and antiviral ("smart") drugs
Leader: Grace Karminski-Zamola

125-0982464-2922 Development of new prodrugs and drugs against viruses and cancer
Leader: Mladen Mintas

125-0982464-2925 Development of new tracer molecules for positron emission tomography (PET)
Leader: Silvana Raić-Malić

Note:

Note: The listed projects belong to the Natural Sciences, Chemistry field.

Project 125-0982464-1356

New heterocycles as antitumor and antiviral ("smart") drugs

Leader: Grace Karminski-Zamola

Summary: Synthesis of new, specially selected heterocyclic systems: benzimidazoles, benzthiazoles, benzimidazoquinolines, benzimidazoquinazolines, oxa (thia)-diazacyclopenta [c]fluorenes, benzazoles, pyrimidobenzimidazoles, oxazolo- and thiazolo-pyrimidinium salts and naphthofuran compounds, all bearing pharmacophoric groups (primarily cyano and protonated amino and amidino groups), as potential antitumor and antiviral ("smart") drugs. Development of new synthetic and photosynthetic methods, specially introducing the photosynthetic methods in water, so called "green photochemistry". Development of microwave synthetic methods. Introducing the molecular modeling and QSAR methods in drug design and synthesis. Research of binding (complexing) new synthesized compounds with DNA and determining the new complexes with spectroscopic and other analytical methods (fluorescence, UV, spectroscopy, NMR spectroscopy, circular dichroism CD, flow linear dichroism LD, electrophoresis, x-ray structural analysis). Complexing of new heterocyclic compounds with metal cations important in living organisms. Development of chemical compounds for photodynamic therapy of cancer which includes the nonactive and (nontoxic) chemical compound in situ of cancer disease and their transformation into antitumor active compound, by using less aggressive electronic irradiation (UV or visible light). Presumption of the mechanism of action of newly prepared compounds as intercalators, groove binders, enzyme topoisomerase I and II suppressors. By using all acceptable scientific methods and knowledge, we would approach the possibilities to synthesize "smart" drugs in anticancer therapy.

Project 125-0982464-2922

Development of new prodrugs and drugs against viruses and cancer

Leader: Mladen Mintas

Summary: Widely spread viral infections and cancer represent a health problem of a worldwide dimension. The main problems in antiviral and cancer chemotherapy are drug resistance and side effects on normal tissues. Therefore, the principal aim of the proposed research is to synthesize the novel compounds that could be used as effective and selective agents against pathogen viruses and human malignant tumors. To achieve this goal the following studies will be performed: (i) the synthesis of novel compounds: A. unsaturated acyclic nucleoside analogues; B. bicyclic pyrimidine derivatives of L-ascorbic acid; C. purine and pyrimidine derivatives of unnatural cyclopropane amino acids; D. amino acid derivatives of hydroxyurea and hydantoins; (ii) the novel compounds will be evaluated against pathogen viruses, in particular, human immunodeficiency virus (HIV), human papilloma virus (HPV), herpes simplex virus types 1 and 2 (HSV-1 and 2) and varicella zoster virus (VZV), and human malignant tumor cell lines (e.g. pancreatic carcinoma (MiaPaCa-2), cervical carcinoma (HeLa)); (iii) the compounds with the most potent activity against HSV-2 and VZV will be evaluated in vitro on human monolayers of skin keratinocytes; (iv) the leading compounds with inhibitory activity (EC₅₀) less than 0.1 µg/mL will be selected for their in vivo evaluation on appropriate animal models. The research proposal is continuation of our previous studies in which we found the leading compounds of the pyrimidine and purine derivatives of L-ascorbic acid (showing potent and selective inhibitory activity against viruses HPV and HIV, and malignant human tumor cell lines MiaPaCa-2 and HeLa), as well as cycloalkyl-N-arylhydroxamic acid derivatives with potent and selective activity against cytomegalovirus. Therefore, our research will be specifically focused on structure optimization of those leading compounds in order to obtain more effective and less toxic antiviral and antitumoral agents. The specific aim of the research is to increase the efficacy of antiviral activity of the nucleoside mimetics leads by their transformation into amino acid phosphoramidate prodrugs. The proposed studies are highly interdisciplinary and objective-oriented. We expect that carrying out the research in this complementary and interdisciplinary approach will result in synergistic effect, and that we would achieve the main goal of the research – to synthesize new effective and selective antiviral or antitumoral agents.

Project 125-0982464-2925

Development of new tracer molecules for positron emission tomography (PET)

Leader: Silvana Raić-Malić

Summary: Positron emission tomography (PET) has become a powerful scientific and clinical tool for probing biochemical processes in the human body. The clinical application of PET using molecules labeled with positron emitting radioisotopes has proven to be vital in the evaluation and diagnosis of diseases such as tumors, neurological disorders, cardiac diseases. Clinical application of the most widely used radiopharmaceutical [^{18}F]-2-fluoro-2-deoxyglucose (FDG) in oncology by PET demonstrates some limitations such as its unspecific activity. Therefore, the use of radiolabeled acyclic nucleoside analogues would be more favourable and more specific approach than FDG for visualizing tumor proliferation. The main objective of this research is development of compounds labeled with positron emitting isotope ^{18}F for potential application in diagnosis of tumors, assessment of therapy response and detection of recurrence using PET. To achieve this goal the following tasks are foreseen: (i) syntheses of the novel C-5 and C-6 disubstituted pyrimidines, C-5 alkyl *N*-(hydroxyethoxymethyl)- and *N*-(1,3-dihydroxy isopentyl)pyrimidines, C-6 acyclic thymidine derivatives, and fluorinated derivatives of acyclovir and pencyclovir, (ii) labeling of precursors containing appropriately protected functionalities with positron emitter ^{18}F and (iii) the demonstration of the monitoring efficacy of the newly developed PET-tracer in situ. The ongoing research will be performed in collaboration with Center for Radiopharmaceutical Science of ETH, PSI, Zürich, Switzerland.

PROGRAM DESCRIPTION

The program is designed to bring together several leading groups currently working in the general area of (bio)organic, physical-organic and computational chemistry from three different institutions (Ruđer Bošković Institute, Faculty of Chemical Engineering and Technology and Faculty of Pharmacy and Biochemistry), in order to achieve an added value in the quality of research by intensive collaboration, thus increasing the scientific output and international competitiveness. The research topics include: (a) synthesis and characterization of novel compounds covering a broad range of novel systems extending from guanidine derivatives, cage hydrocarbons, heterocyclic- and heteropolycyclic-molecules to complex macrocyclic polyethers, ionic receptors, peptide analogues with unnatural amino acids, as well as the peptide analogues of naturally occurring plant phenolic compounds; considerable attention will be also paid to a development of new stereoselective synthetic procedures; (b) reactivity studies in the ground and electronically excited states, encompassing the most characteristic representatives of the families of compounds mentioned above, will be carried out with particular emphasis on the electron and proton (hydrogen atom) transfer in the excited states; (c) mechanistic studies and identification of reactive intermediates; (d) extension of the organic reactivity scales of nucleofugacity and electrofugacity; (e) design of neutral superacids and superbases by using computational chemistry leading to a coalescence of the acidity and basicity scales into a unique ladder and (f) studies of the protein structure and catalytic activity by hybrid QM/MM modeling and computational simulation. Each of the participating groups with altogether 44 researchers, has experience, competence and expertise in a specific segment of the proposed research program, which opens opportunities for a broad interdisciplinary cooperation by sharing knowledge and by rational and economical use of the equipment and other research resources. Consequently, we expect that such collaboration will have synergistic effect on efficacy of our research work and contribute to the quality of the obtained results. It should be stressed that joint efforts will ultimately lead to preparation of novel compounds and materials with targeted properties and to the improved chemical processes of potential use in industry, pharmacology and medicine, apart shedding more light on the studied phenomena.

>>

PROJECTS

Active project of the Faculty of Chemical Engineering and Technology within the program Design, synthesis and reactivity of (bio)organic molecular systems

125-0982933-2926 Heteropolycycles, scaffolds to bioactive compounds.
Synthesis and photochemistry
Leader: Marija Šindler

Note:

The project belongs to the Natural Sciences, Chemistry field.

Project 125-0982933-2926

Heteropolycycles, scaffolds to bioactive compounds. Synthesis and photochemistry

Leader: Marija Šindler

Summary: The proposed research studies unsaturated heterocyclic and polycyclic systems and how their synthesis and reactions, in both the ground and excited states, will allow construction of a variety of hetero-polycyclic compounds as scaffolds for biological investigations. Of key interest are the photochemical intra- and intermolecular cycloadditions and rearrangement reactions and how the use of light can be demonstrated as the environmentally cleanest reagent. The study includes work on heterocycles with oxygen, nitrogen and sulfur as heteroatoms (furan, thiophene, pyrrole, oxazol and sydnone derivatives), the structure determination of all intermediates and isolated products, and the mechanisms of their formation.

PROGRAM DESCRIPTION

The program New functional materials united the scientists from the Republic of Croatia (RC) which are active in the fields of organic, inorganic and physical chemistry, molecular physics and microelectronics. This is the greatest concentration of the scientists which are working in the field of functional materials in RC. This program is also interregional, involving the scientists from the "Ruđer Bošković" Institute, Faculty of Chemical Engineering and Technology and Electrotechnical faculties from Zagreb, Split and Rijeka. The great value of this program is in the fact that it covers the organic and inorganic syntheses, vacuum techniques for the preparation of various films and microelectronics. The coworkers on the program possess the sophisticated instrumentation for the realization of the proposed aims. We have different spectroscopic, microscopic, electrochemical and structural techniques which are needed for the realization of the program, and we have also modern laboratories for the research. One of the aims of proposed program is: (a) to reveal basic rules governing the formation of co-assemblies of constitutionally different gelators and (b) to use this knowledge for preparation of hybrid organosilicas as new functional materials with various possible applications. This program will increase the level of our knowledge in the area of molecular recognition and design of new chiral selectors that are superior in the process of chiral separation. One of the aims of the program is also to achieve a better understanding of the spin crossover phenomena, as well as to synthesize new functional materials with the SCO properties. We shall enlarge our knowledge on the relationship between the syntheses of metal oxides, oxide glasses and glass-ceramics on one hand and their properties on the other one. We shall investigate the kinetics and mechanisms of the crystallization of various aluminosilicates and carbonate compounds. The syntheses and characterization of new metal-organic compounds, specifically of Ta and Nb, will be performed. The syntheses and properties of multicomponent metal hydrides, containing rare-earths, zirconium, transition metal or noble metal, will be investigated. Physico-chemical effects of ionizing irradiation on model systems, including organic, inorganic and biological materials, as well as new dosimetric methods will be investigated. We shall investigate the relationship between the synthesis parameters, morphology and structure of the thin films on one hand and electrochemical properties of the synthesized films on the other one. One of the aims of the submitted program is the determination of relationships between the electronic structure, electric, dielectric and catalytic properties of functional materials and the structure of electrified interfaces. New functional materials will be investigated by the methods of experimental and theoretical vibration spectroscopy. Significant contributions to the submitted program are expected by the scientists involved in new electronic materials, as well as in designing of new circuits in microelectronics.

>>

PROJECTS

Active project of the Faculty of Chemical Engineering and Technology within the program New functional materials

125-0982904-2923 New materials and catalysts for sustainable technologies
Leader: Mirjana Metikoš-Huković

Note:

The project belongs to the Natural Sciences, Chemistry field.

Project 125-0982904-2923 New materials and catalysts for sustainable technologies

Leader: Mirjana Metikoš-Huković

Summary: The main goal of the project is the determination of relationships between the electronic structure, electric, dielectric and catalytic properties of functional materials and the structure of electrified interfaces. The major aim of the proposed research is to develop/design methods for controlled modification of material surfaces in order to obtain highly active/efficient catalysts, thin organic or inorganic passive films, which determine mechanisms and kinetics of surface reactions. Studying and understanding of their physical and electrochemical properties is the basis for application of functional materials in sustainable technologies. In order to achieve the planned goals, research will be done in the following three areas: (1) development, synthesis and characterization of nano-structured catalysts, which are the most expensive and the most complex parts of low-temperature fuel cells and hydrogen generators; (2) preparation and characterization of self-assembled monolayers of organic molecules on metals and alloys; (3) investigation of corrosion properties of biocompatible and engineering metallic materials employing the electrochemical concept of materials science. The research will be done using state-of-the-art in-situ and ex-situ techniques (electrochemical, vibrational, optical-analytical, microscopy, UHV). The research will result in the development of new nano-structured low-temperature fuel cell and hydrogen generator catalysts and electrodes with significantly lower catalyst loadings and an optimized catalyst/solid-electrolyte and catalyst/electrolyte-solution interface. This will contribute to global efforts to decrease our dependence on fossil fuels and non-environmentally-friendly technologies. The research will also contribute to our knowledge in the field of electrocatalysis. This, in turn, will enable researchers to base the design of more active, efficient, cheaper and durable catalysts on phenomena at the electronic/atomic/nano-surface level, rather than on empirical methods. Further contribution is expected in the theory of passivity and bulk-alloy design, especially in the area of development of new biomedical implant materials. The research on nano-structuring of metallic surfaces by organic self-assembled monolayers will enable a wide range of functional surfaces for various applications to be developed (biomaterials, biocatalysts, sensors, etc.).

PROGRAM DESCRIPTION

Seven projects integrated within the program are focused on the research of new materials to be applied in civil engineering, with an aim of improving the conditions of the existing constructions as well as of improving the procedures for design of new constructions. The program covers the various fields of civil engineering, including underground constructions, traffic constructions, residential and infrastructural objects; both basic and advanced methods of investigation are included; standard and modern microscopic and wave measurement methods are applied. Basic investigations include measurements of mechanical, physical and chemical properties of construction material components, like cement, aggregate, clays, rocks, mineral and chemical additives, steel and fibers. The development of cement matrix will be investigated on the nano-, micro-, meso- and macro-levels. The experimental part will include laboratory investigations of cement composites and concrete in the fresh and hardened state, using standard and advanced methods. In the next phase the application of mineral and chemical additives will be investigated, with an aim of optimizing the blend composition to be used in real constructions in various environments. By simulation of the degradation processes, like that of chloride and/or carbonate corrosion, sulfate corrosion, freezing and de-freezing, salts, humidity, increased temperatures and fire, the behavior of materials will be investigated, which will serve as a basis for numerical model description of the processes. In modern cities there is an often need for the foundation of buildings on low-stiffness soils. The technologies of compaction and blending of the soil with natural and artificial materials may provide the solution. Thus new materials are created belonging to the class of cement composites. The properties of the new materials will be investigated in the laboratory, as well as on-site, using improved soil or rocks as undercoat. In addition, a novel constitutional model of the soil will be developed based on the experimental data. Other mathematical models will be developed for the prediction of physical and chemical changes in materials, particularly of the reinforced concrete. The final aim of the program is to improve the state of existing constructions by the application of new materials and more effective protection systems, as well as to improve the methods of designing new concrete and geotechnical constructions by the methods producing new materials.

>>

PROJECTS

Active project of the Faculty of Chemical Engineering and Technology within the program New materials in civil engineering

125-0822161-2982 Inhibiting corrosion by nature-derived compounds: from molecular scale models to application
Leader: Sanja Martinez

Note:

The project belongs to the Technical Sciences, Chemical Engineering field.

Project 125-0822161-2982 Inhibiting corrosion by nature-derived compounds: from molecular scale models to application

Leader: Sanja Martinez

Summary: Corrosion is a natural process by which metallic materials oxidize and shift into the thermodynamically more favorable state concomitantly losing their functionality. The annual cost of corrosion in developed countries is estimated to be 2-4.5 % GNP. In order to compete effectively in the marketplace, advanced technological systems frequently utilize low-cost corrosion-prone materials of construction. Surface modification by inhibitors is an important approach for battling the resulting corrosion problems. The search for new inhibitor formulations is therefore a challenging research topic of scientific studies. The known health and environmental hazards involved in the use of most synthetic corrosion inhibitors are the motivation for the investigation of some nature-designed molecules and blends of naturally synthesized chemical compounds as possible inhibitor candidates. The overwhelming majority of literature on corrosion inhibitors, including those of natural origin, deals with the effects of inhibitors on uniform corrosion in acidic solutions. In neutral and alkaline media, oxide film is frequently present on the surface of the metal and in more aggressive environments this passive film can be destabilized, thus leading to higher rate of metal dissolution through the appearance of localized forms of corrosion. The mechanistic action of inhibitors in such systems is complicated; however, the encouraging results obtained by some authors for nature-derived substances appear to commence a new fruitful field of investigation. The aim of our future research is to study the feasibility of application of non-toxic natural compounds as corrosion inhibitors for construction metals in various engineering systems, in particular those having neutral and alkaline corrosion medium and containing aggressive ions (e.g. chloride contaminated concrete pore water, oilfield brine, natural seawater, etc.). Theoretical and experimental work is being carried out to develop a better understanding of the mode of action of these inhibitors. Molecular modeling techniques that yield molecular descriptors relevant to the inhibitive action are used. Experimental studies include basic electrochemical techniques: electrochemical impedance spectroscopy, polarization resistance, Tafel analysis and transient techniques as well as the supporting surface characterization techniques, e.g. SEM, EDAX, AFM, ATR-FTIR. A significant step towards application will be done within the suggested scientific program that includes testing of the most promising inhibitor candidates for steel structures embedded in concrete specimen. Pilot samples will be made, for evaluation of the beneficial as well as adverse characteristics of the tested inhibitors in service-like conditions.

PROGRAM DESCRIPTION

Changes in global energy markets are the consequence of the limited fossil fuel reserves and their global distribution. The increase of energy demand has an impact on the energy prices growth, especially of the oil and natural gas. The Croatian energy market is highly dependent on the oil and natural gas supplies, since Croatia fulfills 40 % of national energy demand in oil and 27 % in natural gas. Significant part of that are domestic resources and domestic oil and natural gas production. The definition of the proven oil, natural gas and condensate reserves implies the quantities that are obtainable from conventional reservoirs by using state-of-the-art methods of exploitation. The application of advanced technologies may increase the estimated oil reserve quantities by re-activation of old and exhausted reservoirs, poorly draining oil layers, etc. This increases the overall value of the national energy resources. The proposed program consists of several projects, aimed at improving the existing and development of new technologies of oil and natural gas production, development of natural gas consumption technology, improving of environmental protection as well as at rational utilization of fossil fuel resources. Binding point of the projects is technological optimization, economical rationalization and increase of national fossil fuel resource value in present conditions of high prices of energy, especially oil and natural gas, on global market. The program assures the implementation of new scientific results, development and optimization of new solutions, better valuation of the energy potential and utilization of fossil fuel resources in Croatia. The program with projects included serve as a closing point of the energy chain, from energy sources to the final utilization, environmental protection and economics, application of new technologies and new approach to rational energy utilization. The program continues and extends the former research, and intensifies the interdisciplinary and international scientific collaboration, which will lead to the complex valuation of domestic oil and natural gas reserves in conditions of sustainable development.

>>

PROJECTS

Active project of the Faculty of Chemical Engineering and Technology within the program Sustainable Management of Energy Resources (Hydrocarbons) in Croatia

125-1951390-3000 Reducing specific energy consumption in industrial processes
Leader: Rajka Budin

Note:

The project belongs to the Technical Sciences, Chemical Engineering field.

Project 125-1951390-3000 Reducing specific energy consumption in industrial processes

Leader: Rajka Budin

Summary: Valuable proposals for reducing the industrial energy intensity through efficiency improvements and energy sources diversification are the key priority of the long-term energy security and environment protection policies. This concept emerged from the previous three projects supported by the Ministry of Science (1990-1995, 2-05-024; 1996-2002, 125-009; 2002-2006, 0125009). Therefore, newly proposed project is the essential continuation of the previous ones. The aim of the research is the analysis of the influence of the energy as an input to the whole network of industrial processes. Proposed project will be developed to provide guidelines for the more efficient processes related to energy management based on sustainable development. The most important step which must be taken with respect to energy management is to ensure that the advantages of the proposed approach are considered in energy planning and utilization. Therefore, it is necessary to identify which forms of energy are spent, where they are used, where they are lost as well as what is the energy utilization efficiency. Based on relevant data and consumption analysis, the measures for efficiency improvement will be proposed. In many industrial processes there are valuable energy savings by using secondary sources, e.g. by reusing waste heat. With respect to sustainable development, the alternative renewable and non-renewable sources will be searched for and their availability and economics will be investigated. The analysis of energy intensive industrial processes will be followed by examining the possibilities for the increase of conservation efficiency, as well as for the energy source substitution. The relevant data and research methods will give results, which will explain and prove energy savings and the importance of proposed substitutions. The results will take into account the principles of energy conservation, waste heat recovery, alternative sources and environmental protection. The attention will be focused on the extended energy management improvements and environmental protection, wherever the presented energy savings may be achieved with acceptable investments. The results and possible implementation of recommendations in the field of industrial energy conservation will be used in industrial processes in order to balance energy supply and demand, i.e. by reducing the specific energy consumption. It should be pointed out that the improvements in the energy sector are especially important in the light of the structure of EU and RH priority investigation areas, all including the energy strategy. "At what time does the dissipation of energy begin?" William Thomson (Lord Kelvin, 1885).

PROGRAM

CROATIAN STANDARD LEXICOLOGY AND LEXICOGRAPHY

INSTITUTION

Institute for Croatian Language and Linguistics, Zagreb

LEADER

Mirko Peti

PROGRAM DESCRIPTION

The Croatian Standard Lexicology and Lexicography Program is one of the priority and long-time scientific-research programs of the Institute of Croatian Language and Linguistics from Zagreb which is a central scientific institution for the research into the Croatian language. The Program comprises fundamental research into all structural levels of the standard Croatian lexis, from morphological through lexicological to terminological and normative, including writing of various Croatian dictionaries, from a single-volume concise college through general-use and normative to technical, special and multi-volume dictionaries, with a very detailed account of the Croatian standard linguistic lexis. The program also works on the wide representative corpus of the Croatian language which should be the basis for all lexicological research and lexicographic projects. The Croatian Normative Single-Volume Dictionary; Croatian Linguistic Referral Dictionary; Valence Dictionary of the Croatian Verbs; Dictionary of the Croatian Names in Analytical Chemistry, and the Hungarian-Croatian Dictionary are going to be made in the forthcoming 5-year programmatic period. Once completed, all these projects, being part of the Croatian Standard Lexicology and Lexicography Program, will contribute to more efficient organization of the work on a big multi-volume Croatian dictionary. The research into the Croatian lexis is of outstanding importance. It, in the first place, defines the Croatian language as an independent entity. Secondly, the Croatian linguistic culture is being enriched. Thirdly, the Croatian can be presented to the Slavistics and general international public as an independent linguistic entity. Hence, the benefits of this work will be multiple.

>>

PROJECTS

Active project of the Faculty of Chemical Engineering and Technology within the program Croatian Standard Lexicology and Lexicography

125-2120898-3148 Croatian nomenclature in analytical chemistry
Leader: Marija Kaštelan-Macan

Note:

The project belongs to the Humanities, Philology field.

Project 125-2120898-3148 Croatian nomenclature in analytical chemistry

Leader: Marija Kaštelan-Macan

Summary: Chemical analysis is an inevitable part of research in almost all areas of science and arts. Along with its development and application grew the Croatian analytical terminology. All past efforts rendered the terminology irregular and ill-adjusted to the Croatian language standard. This is especially true about the terms in modern analytical methods and the application of analytical chemistry in ensuring the quality of materials, products and environment, the terminology often borrowed disorderly from the English language. As a part of the world exchange of knowledge and information, Croatia has to define its own science language register. The proposed project Croatian Terminology in Analytical Chemistry aims to become a firm link in the chain of systematic work on Croatian scientific terminology. The project's principal goal is to prepare partial glossaries with term definitions for analytical chemistry in general, and various application of analytical chemistry, with the end result to publish a complete encyclopedic dictionary of the Croatian analytical terminology. The second goal of the project is to correlate analytical chemists with linguists in a joint effort to enrich the Croatian language corpus, especially in regard to the scientific terminology. The Croatian terminology in analytical chemistry should be defined and standardized, and consequently adopted on all professional and public levels, as well as applied from primary school to university level education and national institutions. The authors expect that the project and its results shall entice awareness in the Croatian scientific and professional community, about the necessity of using Croatian terms in everyday professional communication, particularly in scientific and educational work. The project shall enrich the Croatian scientific language corpus and meet the challenge of finalizing the efforts of previous generations.

SELF-CONTAINED PROJECTS
OF THE FACULTY OF CHEMICAL ENGINEERING AND TECHNOLOGY

>> **PROJECTS**

- 125-0821504-1976 Research, development and evaluation of polymer composites for use in civil engineering
Leader: Zlata Hrnjak-Murđić
Scientific field: Technical Sciences / Chemical Engineering
- 125-1252086-2793 Biocatalysts and biotransformations
Leader: Đurđa Vasić-Rački
Scientific field: Biotechnical Sciences / Biotechnology
- 125-0000000-1970 Application of biological immobilization for nitrate removal from surface water
Leader: Lucija Foglar
Scientific field: Technical Sciences / Chemical Engineering
- 125-0000000-3210 Development of novel sensors for determination of biologically important analytes
Leader: Stjepan Milardović
Scientific field: Natural Sciences / Chemistry
- 125-0000000-3221 Chemical sensors based on luminescent semiconductor nanocrystals (Quantum Dots)
Leader: Ivana Murković Steinberg
Scientific field: Natural Sciences / Chemistry

Project 125-0821504-1976

Research, development and evaluation of polymer composites for use in civil engineering

Leader: Zlata Hrnjak-Murčić

Summary: In civil engineering, polymer composites have been widely used as thermal and noise insulators, vibration damping, they advance the electrical and mechanical properties of construction materials, they enhance their elasticity, strength and chemical resistance and they are used as flame retardants. Elastomeric isolation bearings are flexible due to their low shear stiffness; they are used to reduce the critical load in buildings induced by seismic vibrations and in bridges induced by traffic vibrations. The tribology of micro/nanoparticle filled polymers is of significant interest because of the ability to alter the properties of the matrix. Nanoparticles embedded in various polymer matrices are reported to reduce considerably the heat released from these materials because they enhance the char formation providing a transient protective barrier and hence slowing down the degradation of the matrix. Nanoelements in polymer composites bring extraordinary mechanical properties, provide the ultimate reinforcement for the next generations of extremely lightweight but highly elastic and very strong advanced composite materials. Concrete also can accomplish extraordinary mechanical properties when polymer fibers and elastomers are incorporated. Polymer fibers and elastomers significantly reinforce material by lowering damping vibrations. Hypothesis of the project is to achieve condition at the interface that provides good bonding of the phases during preparation of multifunction polymer composites. Optimal interface bonding can be achieved by chemical modification or by process of several steps upon manufacture. The both methods involve optimization of interface phenomena by establishing interactions and chemical bonding of the components or by modifying size or shape of micro/nanoparticles. By these methods of compatibilization it is possible to obtain stable morphology and achieve the desired properties. The preparations of polymer composites will be carried out by extrusion, mixing and crosslinking, by controlling and modifying process conditions. Methods used for characterization are: FTIR, DSC, DMA, SEM, TGA, LOI, stress-strain and compression test. The objective of the project is to research, develop and evaluate multifunctional polymer composites in order to extend their limits and applications. The project will be a significant step forward towards the development of innovative materials.

Project 125-1252086-2793

Biocatalysts and biotransformations

Leader: Đurđa Vasić-Rački

Summary: Since early 1970s the use of biotransformations in industry for the "fine" as well as for the traditional chemicals, pharmaceutical and agrochemical intermediates production has steadily increased. Presently, approximately 200 different biotransformations are carried out in industry. Without doubt, there will be an increase in industrial use of biocatalysts over next 10 years because the biotransformations have led to a reduction in waste generation from 10 to 2 tones per ton of product. In the fine chemical sector, it would be in order of one million tons of waste per annum. The use of biocatalysts has proven to be supplementary technology for the chemical industry allowing in some case reactions, which are not easily conducted by classical reactions, or in other cases allowing reactions which can replace several chemical steps. Thus, highly chemo-, regio- and stereo-selective biotransformations can simplify manufacturing processes and make them even more economically attractive and environmentally acceptable. The aim of the project is to examine several biotransformations of industrial interest, notably

those focusing on the continuous synthesis of fine chemicals or intermediates. These reactions are to be investigated in aqueous and non-conventional media. The overall objective of the project is the development of laboratory-scale preparation procedures for some industrially interesting biotransformations using stereospecific biocatalysts: lyases, dehydrogenases (ADH) and oxidases. Dehydrogenases need coenzymes (NAD(P)H) as redox alcohol equivalents, which have to be regenerated. a) Use of isolated enzymes with coenzyme regeneration, b) use of enzymes in the whole cell will be demonstrated, where the following topics should be investigated: enzymatic L-malic acid synthesis, oxidation of alcohol and amino acid and, finally, lignin degradation.

Project 125-000000-1970

Application of biological immobilization for nitrate removal from surface water

Leader: Lucija Foglar

Summary: Quality natural resources management is a basis of sustainable development. Negative environmental influence caused by human activities is encountered through chemical, biological and visual pollution of soil, air and water. Therefore, efficient measures are to be undertaken in order to minimize impact of humans on the environment. Cleaner production, waste water and environmental management are strongly encouraged by law and ecological awareness. Water for public use is generally previously purified by application of selective ion exchangers. Accordingly, nitrate selective ion exchange resins are used for nitrate removal. Resulting wastewater containing increased nitrate and NaCl concentrations should be treated before releasing in environment. The biological treatment is commonly applied for that purpose and is also used in surface water purification processes. Usually, suspended microbial cells are applied, but use of immobilized cells is investigated, too. Main goal of this project is to investigate the possibilities to use immobilized cells for nitrate removal from surface water. The immobilization on zeolite and nitrate selective exchange resins will be investigated in order to achieve more effective water purification. Zeolites as carriers of bacterial cells have many advantageous structure and composition properties and are available as natural resources in Croatia. Cells immobilized on nitrate selective exchange resins would enable simultaneous bonding and degradation of bonded nitrate ions on resin beads, and regeneration of saturated resin beads would be avoided. Kinetic model of process will be proposed and the results of laboratory investigations will be applied in natural environment. Investigation and optimization of process parameters will result in expected decrease of present surface water contamination and cleaner environment. Furthermore, decrease of numerous harmful effects (such as eutrophication, decrease and death of vegetable or animal species in water) is expected. At the same time the investigation stays open for considering other problems that cause negative environmental impact.

Project 125-1252973-2576

Development of novel sensors for determination of biologically important analytes

Leader: Stjepan Milardović

Summary: Quality of life is closely linked to the control of diseases, quality of environment and food quality. In all mentioned fields a continuous, sensitive and fast monitoring is required to control the key parameters. There is also an increasing demand for inexpensive and reliable sensors to allow, not only routine monitoring in the laboratory, but also analysis for individual at home. Biosensors, combining a biological recognition element and a transducer, represent a very powerful tool for such a complex task. The biological recognition element of biosensor interacts selectively with the measuring analyte whereas the physiochemical transducer supplies an electrical output signal. Mainly, recognition biological elements can be classified into two groups: biocatalysts (enzymes, tissue materials, microorganisms) and bioligands (nucleic acids antibodies). The transducers are responsible for converting biological response, resulting

from the interaction with target analyte, into quantifiable measuring signal. Several types of transducers have been used, such as electrochemical (potentiometric, amperometric), polarimetric, piezoelectric and thermal. The group of researchers who participate in this project for many years have been directed towards electrochemical methods of analysis based on biosensor application. Recently, some biosensors for metabolite determination (glucose and urea) and oxalate determination in urine have been constructed. Also, the new electrochemical methods for determination of total antioxidant capacity of food and beverages were developed and published. The goal of the project is to develop novel biosensors based on application of bioligands or biocatalyst immobilized on the surface of inorganic nanostructured metallic particles, mainly silver and gold. The immobilization of nonmetallic materials such as carbon nanotube, clay nanoparticles or metal-modified clay nanoparticles will be the one of the main interest of the proposed project. Development of analytical procedures that allow separation and affinity binding on the SAM (self-assembled monolayer) modified electrodes of metabolites, proteins or antioxidants will also be an important part of the proposed project. The electrodes such as glassy carbon electrode, interdigitated microelectrode, arrays interdigitated microelectrode and SAM-modified electrode will be used. Analytes that can be tested are: metabolites, proteins, antioxidants and nucleic acids.

Project 125-000000-3221

Chemical sensors based on luminescent semiconductor nanocrystals (Quantum Dots)

Leader: Ivana Murković Steinberg

Summary: The focus of this project is development of functional materials for optical sensors for use in integrated chemical analytical systems. Optochemical sensors represent a group of chemical sensors that use optical transduction to obtain analytical signals. Amongst various optical methods available, fluorescence-based methods are popular because of high sensitivity and diversity of parameters that provide analytical information. The implementation of spectroscopic schemes into useful sensing mechanisms requires the application and correct combination of appropriate materials such as polymers and particles, indicator probes, molecular receptors, carriers, catalysts and fluorescent semiconductor materials. The most promising alternative to conventional organic fluorophores are semiconductor nanocrystals, or "quantum dots" (QDs). Quantum dots are colloidal semiconductor nanocrystals that exhibit novel optoelectronic properties like high emission quantum-yields, size-tunable luminescent properties, narrow spectral bands, and high chemical and photophysical stability. Most QD applications in optical sensing have been limited to solution-based sensing chemistry. The transformation of such assays into solid-state formats is the next step in the development of QD based materials, especially for analytical applications like flow-injection, microfluidics, and fluorescence-based microarrays. The overall objective of this project is to develop novel optical sensing schemes based on immobilised quantum dot nanocrystals that exploit their unique luminescent properties. The project aims to explore the transformation of QD fluorescence solution-based sensing schemes into the solid-state. A range of hybrid materials containing QDs will be engineered using different material fabrication and immobilisation techniques, focusing on methods compatible with standard film & spot deposition for fabrication of integrated chemical systems (screen printing, dip coating, spin coating, array spotting). Novel QD based luminescent materials will be characterised, and their structural, optical and electronic properties assessed. It is anticipated that the photophysical and chemical characterization of these novel materials will reveal opportunities for development of innovative sensors and generic sensing schemes, particularly via analyte-induced QD surface interactions, or analyte mediated energy transfer based phenomena, such as fluorescence resonance energy transfer (FRET).

INTERNATIONAL ACTIVITIES OF THE FACULTY OF CHEMICAL ENGINEERING AND TECHNOLOGY

One of the important tasks of Faculty of Chemical Engineering and Technology is the promotion and development of international scientific and teaching collaboration. The cooperation with foreign universities, scientific and research institutions and international associations would contribute significantly to the realization of fundamental aims of development of the Faculty as well as of its vision.

The openness and contact with institutions abroad enable the continuous comparison of our curricula and scientific achievements with world-wide trends and accepting of international criteria for validation of science and high education.

International activities of FKIT include:

- International scientific bilateral and multilateral projects,
- Inter-University and Inter-Faculty collaboration agreements,
- Exchange of researchers, teachers and students,
- Organization of international meetings and symposia,
- Collaboration in international associations.

INTERNATIONAL SCIENTIFIC PROJECTS

Faculty of Chemical Engineering and Technology is involved in 7 international scientific projects. Most of them (5) is of bilateral nature; the partners come from China, Hungary and Slovenia:

Table 5. Bilateral international projects of the Faculty of Chemical Engineering and Technology

Project title	Partner country	Time frame
Abatement of volatile organic compounds by catalytic combustion and photocatalytic oxidation	China	October 5, 2007 – October 5, 2009
Study on biotransformations of industrial interest in aqueous and non-conventional media	Hungary	2007 –
Fundamental and applied research of conducting polymers	Hungary	2007 –
Development of chromatographic methods for determination of proanthocyanidins in food and nutraceuticals	Slovenia	January 1, 2007 – December 31, 2008
The preparation of polymeric nanocomposites using layered silicates modified by polyions	Slovenia	January 1, 2007 – December 31, 2008

FKIT is involved in the project:

Reduction of environmental risks posed by pharmaceuticals and their degradation products in process wastewaters, through RO/NF membrane treatment (REPHAD), UKF, December 1, 2007 – November 30, 2010

The project is financed by the “Unity through Knowledge Fund”, Program of the scientific collaboration. This project is performed in collaboration with the Catalan Institute for Research and Advanced Studies ICREA, Barcelona, Spain. Program of the scientific collaboration of the “Unity through Knowledge Fund” is based on the collaboration of Croatian diaspora and scientists in Croatian institutions. The collaboration is aimed at establishing the permanent relationship that would enable the transfer of knowledge to Croatia and attract the foreign funding and investments (e.g. through FP7 system) as well as funding from the industry.

The scientists of the Faculty of Chemical Engineering and Technology are involved in the multilateral EUREKA project:

Natural Zeolites In Water Quality System, EUREKA, May 1, 2008. – May 1, 2011

The collaborating institutions come from Croatia, Slovenia and Serbia. The coordinator is the Chemical Institute Ljubljana (Slovenia). The partners are: FKIT, Cwg d.o.o. (Croatia), Silkem d.o.o. (Slovenia), Faculty of Technology and Metallurgy of the University of Belgrade (Serbia), Faculty of Agriculture of the University of Belgrade (Serbia) and Gm Water d.o.o. (Serbia). The main aim of the EUREKA program is to foster the research efforts of enterprises and development of innovative capacities. The projects should result in new products or services that promote advanced technologies to be offered in the market.

INTER-UNIVERSITY AND INTER-FACULTY COLLABORATION AGREEMENTS

FKIT has initiated the ratification of two bilateral Inter-University collaboration agreements. The agreement with the University of Pannonia, Veszprem, Hungary was signed at the beginning of 2008. The proposal for the ratification of bilateral agreement with the Swiss Federal Institute of Technology, Zürich (ETH) was mailed in May 2008. Within the bilateral agreements signed, FKIT successfully collaborates with the Universities of Ljubljana and Maribor (Slovenia).

EXCHANGE OF RESEARCHERS, TEACHERS AND STUDENTS

The exchange of professors and students is realized through bilateral agreements, or through scientific projects. Foreign lecturers are welcome guests at FKIT; our teachers present lectures at foreign universities as well.

A very effective way of exchange of teachers and collaboration with high education institutions in the European Union is via TEMPUS projects. The Faculty of Chemical Engineering and Technology is the coordinator of the TEMPUS project:

Environmental Management – Policy and Sustainability Study (EMPS) International, Interdisciplinary, Postgraduate, Specialist Program, September 1, 2005 – September 1, 2009

Short study visits are organized within the CEEPUS projects, where FKIT contributes as a partner:

- **Education in separation and identification of organic xenobiotics in environmental samples and food product, CEEPUS, 2008 –**
- **Education of Modern Analytical and Bioanalytical Methods, CEEPUS, 2007 –**
- **International Study in Automatic Control, CEEPUS, June 1, 2005 – June 1, 2010**

The National Foundation for Science, High Education and Development of Technology of the Republic of Croatia has approved the support to the project:

Distributed wireless sensors for smart chemical and biological detection systems: chemo- and biosensor interface and applications development, NZZ, Brain Gain – Guest, 2008

The project is performed at the Faculty of Chemical Engineering and Technology under the guidance of a visiting scientist. The foundation provides the financial support for the scientific, high-education or technology programs and projects as well as for the collaboration in the field of high-education. The aim of the Brain Gain – Guest program is to give an opportunity for foreign scientists to work in Croatia on their projects.

ORGANIZATION OF INTERNATIONAL MEETINGS AND SYMPOSIA

Our scientists are particularly active in organizing the international conferences and symposia. We mention the following conferences organized within the last 5 years:

- 14th International Symposium on Separation Science “New Achievements in Chromatography”, September 30 – October 3, 2008, Primošten, Croatia
- 10th International School of Ion Chromatography, June 3-6, 2008, Brijuni, Croatia
- 2nd International Conference on Laboratory Competence 2007 – The New Approach, October 18-20, 2007, Cavtat, Dubrovnik, Croatia
- IUPAC International Workshop on the Impact of Scientific Developments on the Chemical Weapons Convention, April 22-25, 2007, Zagreb, Croatia
- 2nd International Symposium on Environmental Management (SEM) “Environmental Management; Contribution to Solution”, September 12-14, 2007, Zagreb, Croatia
- International Symposium on Air and Water Pollution Abatement, AWPA 2007, June 21-23, 2007, Zakopane, Poland
- 9th International School of Ion Chromatography, September 4-7, 2006, Primošten, Croatia
- Young Investigator Seminar on Analytical Chemistry (YISAC), July 5-8, 2006, Zagreb, Croatia
- International Symposium on Air Pollution Abatement Catalysis, APAC 2005, September 21-24, 2005, Krakow, Poland

INTERNATIONAL ASSOCIATIONS

The members of the Faculty of Chemical Engineering and Technology are involved in many international scientific associations.

Table 6. Activity in international scientific associations

Naziv udruge	Ime	Svojstvo
European Federation of Chemical Engineering (EFCE)	Vesna Tomašić	Representative of the Croatian Society of Chemical Engineers
European Polymer Federation (EPF)	Marica Ivanković	Croatian representative
European Federation of Biotechnology (EFB). Section of Applied Biocatalysis (ESAB)	Đurđa Vasić-Rački	Member of the Scientific Committee
Network of Universities from the Capitals of Europe (UNICA)	Helena Jasna Mencer	Member of the Steering Committee Member of the Working Group for European Projects
European Environment and Sustainable Development Advisory Councils (EEAC)	Natalija Koprivanac	Members of the Working Group for Sustainable Development
European University Association (EUA). Evaluation Committee within the Institutional Evaluation Programme	Helena Jasna Mencer	Evaluator, full member of the Committee
Hungarian Accreditation Committee (HAC)	Helena Jasna Mencer	Foreign expert

JOURNALS

In the last five years, the teachers and scientists of the Faculty of Chemical Engineering and Technology have published their articles in more than 150 journals cited in the Current Contents database. Most of the journals belong to the fields of chemical engineering, materials science and engineering, chemistry, biotechnology and environmental science.

In Figure 1, the number of journals that published articles from FKIT is shown. The journals are sorted according to the area of science, based on WOS and SCOPUS databases (chemical engineering, materials science and engineering, chemistry and biotechnology).

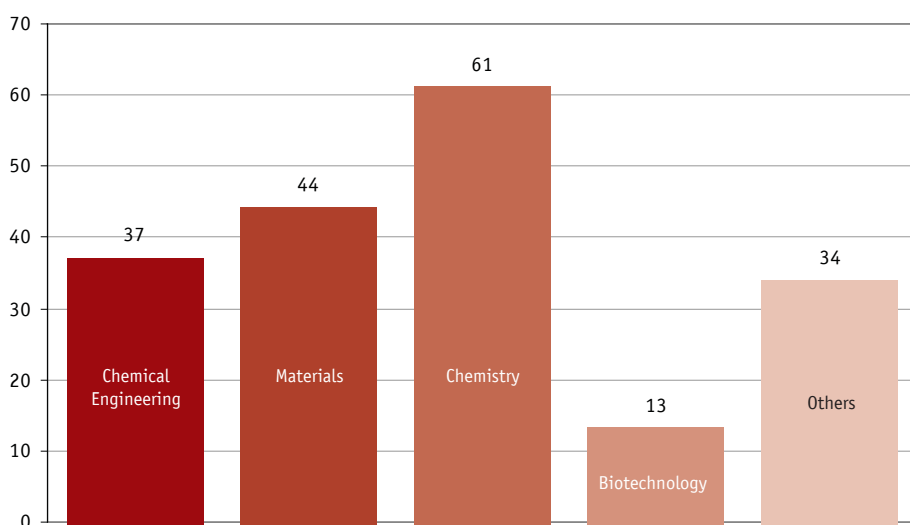


Figure 1. The number of journals listed in Current Contents database that have published articles from FKIT in the last five years. The journals are sorted according to the scientific area. The Others category include journals from the fields of mathematics (3), physics (4), biochemistry (2) and environmental science (13).

The average impact factor of the journals that have published articles from FKIT is 1.946 (for 2006).

The average impact factors for particular scientific areas are:

- Chemical engineering: 1.723;
- Materials science and engineering: 1.931
- Chemistry: 2.124
- Biotechnology: 1.765

The journals that have published particularly many articles from FKIT are:

- Journal of Applied Polymer Science, materials, IF=1.306
- Chemical and Biochemical Engineering Quarterly, chemical engineering, IF=0.357
- Electrochimica Acta, chemistry, chemical engineering, IF=2.995
- Journal of Medicinal Chemistry, chemistry, IF=5.115
- Bioorganic & Medicinal Chemistry, chemistry, IF=2.624
- Croatica Chemica Acta, chemistry, IF=0.778
- Journal of the Electroanalytical Chemistry, chemistry, IF=2.339
- Journal of Hazardous Materials, chemical engineering, environmental science, IF=1.855.

Other important journals that have published some articles from FKIT are:

- Catalysis Today
- Chemical Engineering Journal
- Chemical Engineering and Processing
- Chemical Engineering & Technology
- Industrial and Engineering Chemistry Research
- Journal of Membrane Science
- Journal of Separation Science
- Separation and Purification Technology
- Chemical and Biochemical Engineering Quarterly
- International Journal of Chemical Reactor Engineering
- Water Research
- Dyes and Pigments

- Journal of Applied Polymer Science
- Journal of the European Ceramic Society
- Journal of Non-Crystalline Solids
- Journal of Polymer Science Part A - Polymer Chemistry
- Polymer Degradation and Stability
- Thermochimica Acta

- Electrochemistry Communications
- Electrochimica Acta
- Journal of the Electroanalytical Chemistry
- Journal of the Electrochemical Society
- Journal of Chromatography A
- Talanta
- TrAC Trends in Analytical Chemistry
- Journal of Medicinal Chemistry
- Journal of Organic Chemistry
- Journal of Photochemistry and Photobiology A – Chemistry
- Chemistry A-European Journal
- Tetrahedron
- Tetrahedron Letters

- Biotechnology and Bioengineering
- Enzyme and Microbial Technology
- Advances in Biochemical Engineering/Biotechnology
- Bioresource Technology
- Biosensors & Bioelectronics
- Process Biochemistry

ARTICLES

In Figure 2, the number of articles that have been published by FKIT in the last five years is shown, again sorted according to scientific areas of interest.

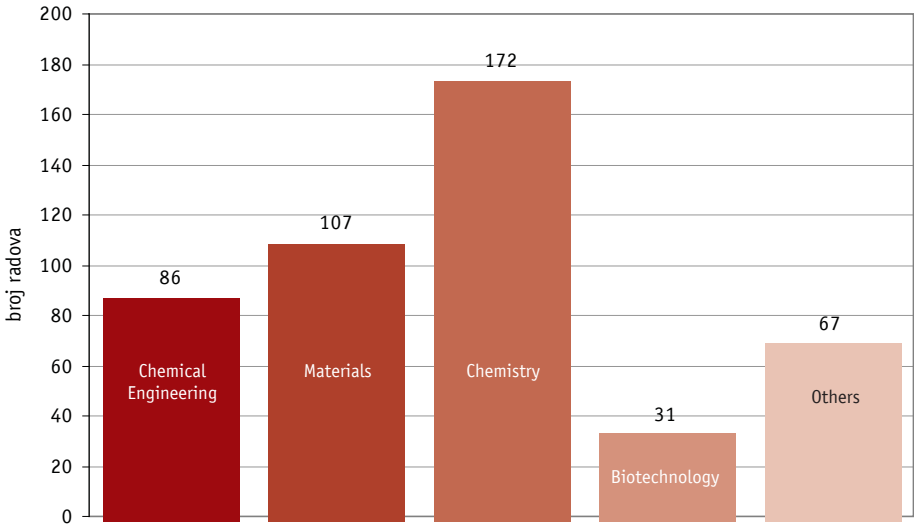


Figure 2. The number of articles that have been published in the last five years in journals cited by the Current Contents database. The articles are sorted according to the scientific areas of interest, based on WOS and SCOPUS databases. The Others category include journals from the fields of mathematics, physics, biochemistry and environmental science.

In Figure 3 the number of articles is sorted according to the year of publication.

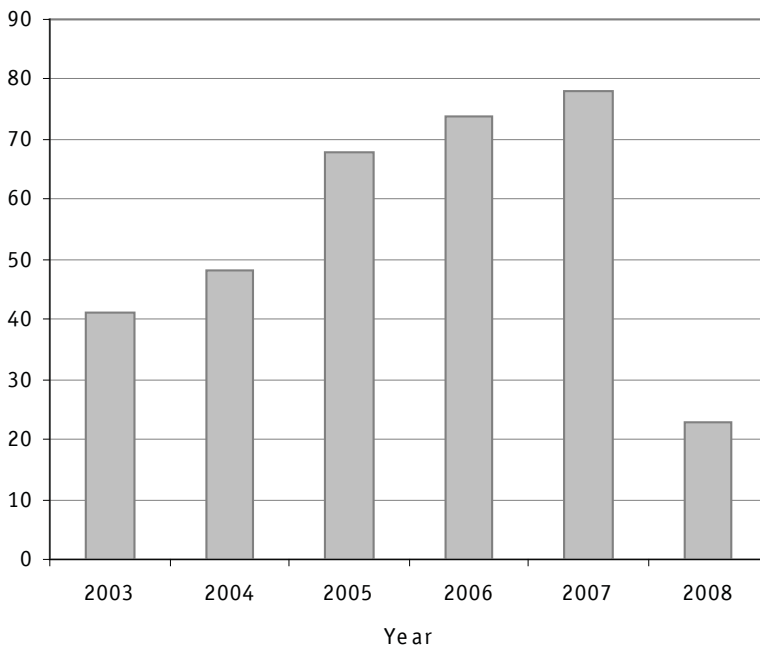


Figure 3. The number of published articles by FKIT, according to the Web-of-Science (WOS) database.

In Figure 4 the long-term publication activity of FKIT (since 1992) is shown. The number of citations is included.

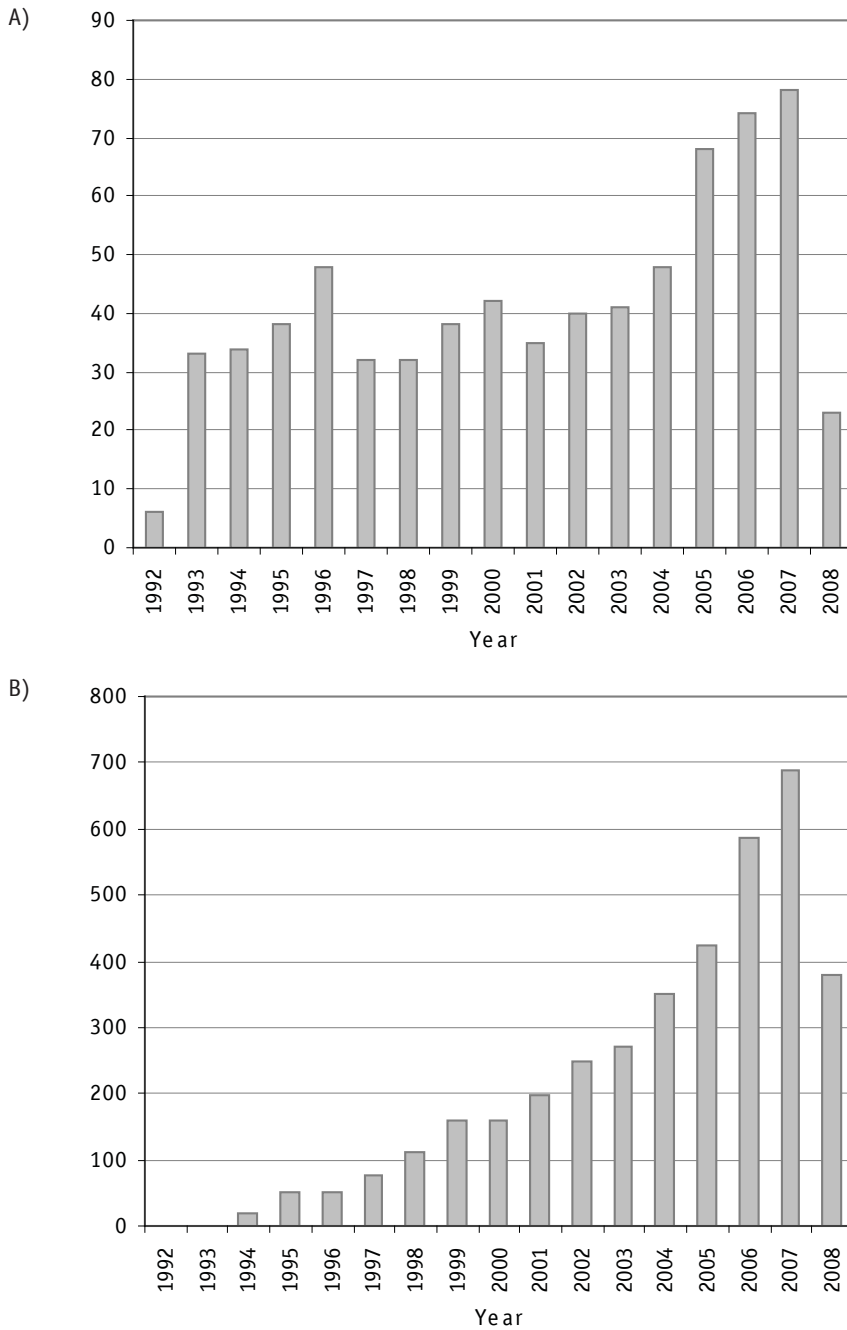


Figure 4. A) the number of published articles by FKIT according to the Web-of-Science (WOS) database; B) the number of citations.

Alltogether, 719 articles have been cited 3798 times. The average citation is 5.28. The institutional h-index is 26.



PROFESSIONAL PROJECTS

The Faculty of Chemical Engineering and Technology dedicates much of its activity to professional projects; the knowledge acquired by the scientific work is transferred directly to industry. In the last two years, FKIT has worked on 18 professional projects. The projects are listed in Table 7.

The largest portion of the projects is dealing with the protection of environment: environmental hazard studies or wastewater treatment solutions.

The “Intelligent building” project, that resembles the Swiss Minergie standard, was applied for the first time in Croatia by the Faculty of Chemical Engineering and Technology in collaboration with the Swiss enterprises SENCON Energy GmbH, Appenzell and WILD und Partner AG, Appenzell.

FKIT is currently involved in a new project in the field of environmental protection. The project is entitled “E-home” and presents a residential building that would be constructed of natural materials, energy-efficient, ecologically sustainable and in accordance with the principles of healthy living.

Table 7. Professional projects of the Faculty of Chemical Engineering and Technology in the last two years

Project title	Client	Year	Duration
The setup of an interactive mass and energy balance of the „black box“ type for the melting of raw materials in cupola furnace	Knauf Insulation d.o.o. Novi Marof	2008	Less then 3 months
Project documentation for a methanol storage facility as a part of biodiesel production plant	Biona d.o.o. Varaždin	2008	Less then 3 months
The basic technology project for the absorption of gases evolving from the reactor section	Petrokemija d.d. Kutina	2007	Less then 3 months
The environmental hazard study for a biodiesel plant	INGRA d.d. Zagreb	2007	Less then 3 months
The environmental hazard study for a biodiesel plant	Europa Mil-biogoriva d.o.o.	2007	Less then 3 months
The energy efficiency study for a residential and office building	Agria d.o.o. Karanac - Osijek	2007	Less then 3 months
The environmental hazard study for a mobile concrete-production plant	Unija d.o.o. Vukovar	2007	Less then 3 months
The environmental hazard study for a biodiesel plant	KAMIX d.o.o. Varaždin	2007	Less then 3 months
The assessment of the functionality and preparation of immersed membranes in wastewater management systems	Tekija d.o.o. Požega	2007	3 months – 1 year
The solution for the wastewater treatment in a antibiotics (Azithromycin) production plant	Pliva Hrvatska d.o.o. Zagreb	2007	3 months – 1 year
The conditions for achieving the Minergie (Swiss energy) standard for a residential and office building	Agria d.o.o. Karanac - Osijek	2007	3 months – 1 year
The testing of the corrosion status of the main Croatian oil pipeline (NACE RP0502 norm)	Jadranski Naftovod d.d. Zagreb	2007	3 months – 1 year
The technical proposal for the optimal re-designing of main and auxiliary plants in the Petroleum Refinery Sisak	Centar za transfer tehnologije Zagreb	2007	3 months – 1 year
The environmental hazard study for a waste oil conditioning plant	Rijekatank d.o.o. Zagreb	2007	3 months – 1 year
The general agreement on the collaboration in the field of doctoral and specialist study programs, as well as on the realization of common scientific and research and development projects	Končar-Institut za elektrotehniku d.d. Zagreb	2008 –	Over a year
The general project for the conservation and protection of the ecosystem in a large petrochemical facility – wastewater treatment	DINA-Petrokemija d.d. Omišalj	2008 –	Over a year
Desulfurization of FCC gasoline by liquid extraction	INA Industrija nafte d.d.	2006 –	Over a year
Optimization of light gasoline isomerization process	INA Industrija nafte d.d.	2006 –	Over a year

