

# KEEMIA- JA MATERJALITEHNOLOOGIA TEADUSKONNA KEEMIATEHNIKA INSTITUUDI TEADUS- JA ARENDUSTEGEVUSE AASTAARUANNE 2011

## 1. Instituudi struktuur

Instituudi direktor professor Vahur Oja

- Keemiatehnika õppetool, Chair of Chemical Engineering, professor Vahur Oja
- Keskkonnakaitse ja keemiatehnoloogia õppetool, Chair of Environmental and Chemical Technology, professor Marina Trapido

## 2. Instituudi teadus- ja arendustegevuse (edaspidi T&A) iseloomustus

2.1 struktuuriüksuse koosseisu kuuluvate uurimisgruppide

2.1.1 teadustöö kirjeldus (*inglise keeles*);

### **Keemiatehnika uurimisgrupp**

The research team is actively engaged in following research aspects: phase equilibria and thermodynamic and transport properties of oil shale derived materials; kerogen-solvent interactions; mixture volatilization parameters and vaporization of specific compounds from complex matrices; fundamental aspects of oil shale thermal degradation; optimum conditions and potential strategies for elimination of refractory pollutants from air by photocatalytic oxidation.

### **Keskkonnakaitse ja keemiatehnoloogia uurimisgrupp**

Activities of the research group have already 20 years been focused on advanced chemical oxidation as well as combined treatment (chemical + biological oxidation) of polluted water, wastewater and soil. Application of ozone together with hydrogen peroxide, UV irradiation and solid catalyst, photocatalysis in the presence of UV or visible light and appropriate active catalysts, Fenton process ( $\text{H}_2\text{O}_2/\text{Fe}(\text{II})$ ) etc. create powerful  $^{\circ}\text{OH}$ -radicals which non-selectively attack organic pollutants in water, wastewater and soil (PCB, MTBE, phenols, ethylene glycol, pesticides etc.). Traces of organic contaminants or micropollutants: pesticides, biocides, pharmaceuticals, etc are frequently detected in drinking water sources around the world. Application of this oxidative technology (including the Fenton process) seems to be the only solution for effective destruction of such kind of micropollutants.

2.1.2 aruandeaastal saadud tähtsamad teadustulemused (*inglise keeles*).

### **Keemiatehnika uurimisgrupp**

Basic thermodynamic properties (Hildebrand and Hansen solubility parameters, Flory-Huggins interaction parameters) of two Estonian oil shales (Kukersite and Dictyonema) were re-evaluated based on experimental swelling data and available swelling theories. A new DSC based technique was developed to determine quantitatively absorbed solvent in the swollen matrix. Vapor pressure and heats of vaporization data on oil shale based liquids/oils were measured. In photocatalytic air treatment the full-factorial experiments were carried out varying contact times, concentrations of pollutants and temperatures in continuous gas-flow mode degrading aliphatic acrylonitrile and aromatic toluene to evaluate the gas-phase photocatalytic activity of a  $\text{TiO}_2$  nanopowder synthesized in a flame aerosol reactor.

### **Keskkonnakaitse ja keemiatehnoloogia uurimisgrupp**

In 2011 the degradation kinetics of one pesticide (Atribuut®; active component propoxycarbasonesodium) and two pharmaceuticals (sulfamethoxazole, ibuprofen) with classic Fenton process and its modifications was studied. For each micropollutant the most suitable treatment process, optimal treatment conditions and oxidant doses were determined. The efficacy of the Fenton treatment for micropollutants removal was evaluated in the pure water, wastewater and urea matrixes. The efficiency of different iron catalysts in the modified Fenton treatment for degradation of picric acid was evaluated. Studies in the field of pure photocatalysis were continued with the efficiency tests with the new elaborated active catalysts effective in visible light. Several aromatic organic pollutants destruction in water solutions was significantly accelerated. Elaborated on pilot plant technology for radionuclides Ra<sup>226</sup> and Ra<sup>228</sup> removal together with iron and manganese from groundwater was applied in full scale at the Viimsi new WTP.

2.2 Uurimisgrupi kuni 5 olulisemat publikatsiooni läinud aastal.

### **Keemiatehnika uurimisgrupp**

Krichevskaya, M.; Klauson, D.; Portjanskaja, E.; Preis, S. (2011). The cost evaluation of advanced oxidation processes in laboratory and pilot-scale experiments . *Ozone: Science & Engineering*, 33, 211 - 223.

Jõks, S.; Krichevskaya, M.; Preis, S. (2011). Gas-phase photocatalytic oxidation of acrylonitrile on sulphated TiO<sub>2</sub>: continuous flow and transient study. *Catalysis Letters*, 141(2), 309 - 315.

### **Keskkonnakaitse ja keemiatehnoloogia uurimisgrupp**

Goi, A.; Viisimaa, M.; Trapido, M.; Munter, R. (2011). Polychlorinated Biphenyls-Containing Electrical Insulating Oil Contaminated Soil Treatment with Calcium and Magnesium Peroxides. *Chemosphere*, 82(8), 1196 - 1201.

Dulova, N.; Trapido, M.; Dulov, A. (2011). Catalytic degradation of picric acid by heterogeneous Fenton-based processes. . *Environmental Technology*, 32(4), 439 - 446.

2.3 Loetelu struktuuriüksuse töötajate rahvusvahelistest tunnustustest.

2.4 Loetelu struktuuriüksuse töötajatest, kes on välisakadeemiate või muude oluliste T&A-ga seotud välisorganisatsioonide liikmed.

### **Prof Vahur Oja -**

European Federation of Chemical Engineering, töögrupi Thermodynamics and Transport Properties liige

European Federation of Chemical Engineering, töögrupi Education liige

### **Emeriitprof Rein Munter -**

BALTECH Õppetöö koostöögrupi liige

Rahvusvahelise Osooni Assotsiatsioon (IOA) nõukogu liige

Rahvusvahelise Vee Assotsiatsiooni (IWA) liige

## 2.5 Aruandeaasta tähtsamad T&A finantseerimise allikad.

- AR10129, Põlevkivitehnoloogiarendustöös vajalike ainesüsteemide termodünaamilised omadused: eksperimentaalne ja arvutuslik määramine ning määramisvõimaluste parendamine, professor Vahur Oja
- T719, Tehnoloogiliste protsesside intensiivistamine aktuaalsete keskkonnaprobleemide lahendamiseks, emeriitprofessor Munter Rein
- T022, Keemiatehnilised aspektid keskkonnariskide hindamisel, professor Oja Vahur

2.6 Soovi korral lisada aruandeaastal saadud T&A-ga seotud tunnustusi (va punktis 2.3 toodud tunnustused), ülevaate teaduskorralduslikust tegevusest, teadlasmobiilsusest ning anda hinnang oma teadustulemustele.

### **Teaduskorralduslik tegevus**

#### **Prof Vahur Oja**

Ajakirja "Oil Shale" nõuandva kolleegiumi liige

TTÜ nõukogu majanduskomisjoni liige

TTÜ Keemiateaduskonna nõukogu liige

TTÜ Keemiateaduskonna nõukogu õppekavakomisjoni liige

Eesti Keemia Seltsi juhatuse liige

#### **Prof Marina Trapido**

TTÜ Keemiateaduskonna nõukogu liige

#### **Emeriitprof Rein Munter**

Ajakirja "Ozone: Science and Engineering" toimetuse liige

Ajakirja "Water Chemistry and Technology" toimetuse liige

#### **Emeriitprof Valdek Mikkal -**

Eesti Keemia Seltsi juhatuse liige

### **Teadlasmobiilsus**

#### **Prof Vahur Oja**

19th European Conference on Thermophysical Properties, Thessaloniki, Greece, August 28-September 1. 2011

Savest, N.; Oja, V. Heat capacities of kukersite oil shale in comparison with available data of other oil shales.

Osalemine EFCE töögrupi Working Party on Thermodynamics and Transport Properties koosolekul, 18. november, 2011, Frankfurt

#### **Prof Marina Trapido**

Ozone and UV Leading-Edge Science and Technologies: 20th IOA World Congress - 6th IUVA World Congress, Paris, France, 23-27 May 2011.

Epold, I.; Barajeva, P.; Veressinina, Y.; Trapido, M.. Degradation of emerging pharmaceuticals in water/wastewater matrix with advanced oxidation processes: a comparative study.

#### **Emeriitprof Rein Munter**

Ozone and UV Leading-Edge Science and Technologies: 20th IOA World Congress - 6th IUVA World Congress, Paris, France, 23-27 May 2011.

Munter, R "Static mixers for ozonation of water"

**Doktorant Oliver Järvik**

Ozone and UV Leading-Edge Science and Technologies: 20th IOA World Congress - 6th IUVA World Congress, Paris, France, 23-27 May 2011.

Järvik, O.; Saarik, V.; Osadchuk, I.; Viiroja, A.; Kamenev, I. Influence of Activated Carbon on Ozonation of Phenolic Wastewater.

**Doktorant Aleksandr Dulov**

Ozone and UV Leading-Edge Science and Technologies: 20th IOA World Congress - 6th IUVA World Congress, Paris, France, 23-27 May 2011.

Dulov, A.; Dulova, N.; Veressinina, Y.; Trapido, M.. Application of advanced oxidation technologies for propoxycarbazone-sodium degradation.

**Doktorant Marika Viisimaa**

Ozone and UV Leading-Edge Science and Technologies: 20th IOA World Congress - 6th IUVA World Congress, Paris, France, 23-27 May 2011.

Viisimaa, M.; Veressinina, J.; Goi, A. Enhanced Degradation of Polychlorinated Biphenyls in Soil by Hydrogen Peroxide, Persulfate and Ozone

**Doktorant Svetlana Jöks**

International conference "Photocatalytic and Advanced Oxidation Technologies for Treatment of Water, Air, Soil and Surfaces (PAOT)", Gdansk, Poland, July 4-8, 2011.

Jöks, S.; Klauson, D.; Krichevskaya, M.; Preis, S.; Moiseev, A.; Qi, F.; Deubner, J.; Weber, A. Gas-phase photocatalytic activity of nanostructured titanium dioxide from diffusion flame synthesis.

**Vanemteadur Anna Goi**

International conference "Photocatalytic and Advanced Oxidation Technologies for Treatment of Water, Air, Soil and Surfaces", Gdansk, Poland;

„DDT-contaminated soil treatment with persulfate and hydrogen peroxide applying different activation aid“

FCES' 2011, Finnish Conference of Environmental Science, Turku, Finland;

„Peroxidation for remediation of chlorinated hydrocarbons contaminated soil“

Oponent doktoritööle - Ruth Garcia de la Calle (Extremadura Ülikool, Badajoz, Hispaania, 2. september 2011.a.)

Välisdoktorandi stažeerimise juhendaja, ESF DoRa programm, tegevus 5 - doktorant Nalan Bilgin Öncü (University of Boğaziçi, Türgi, 3 kuud)

**Hinnang teadustulemustele**

„Meetme „Energiatehnoloogia teadus-ja arendustegevuse toetamine“ tingimused“ raames saadi finantseering projektile AR10129 “ Põlevkivitehnoloogiate arendustöodes vajalike ainesüsteemide termodünaamilised omadused: eksperimentaalne ja arvutuslik määramine ning määramisvõimaluste parendamine“ projektijuht professor Vahur Oja

Edukas oli koostöö Eesti Energia Õlitööstus ASiga. 2011. aastal sõlmiti uus leping.

Teadustegevuse osas on instituut täitnud oma funktsiooni: tähtsamate tegevustena on edukalt jätkatud magistri ja doktoritööde juhendamist (instituudil oli 13 doktoranti), eriti doktoritööde osakaal on märkimisväärne; tegevustest tulenevaid publikatsioone ja konverentsidel peetud ettekandeid on küllaldaselt; jooksvad uurimisprojektid koos partneritega on ootuspäraselt edasi arenenud. Siinjuures tuleb mainida, et seda vaatamata oluliselt raskendatud töökeskkonnale aasta esimesel poolel, ehk kapitaalremondi järgsele ajale instituudi ruumides.

TTÜ keemiatehnika instituudi teadus- ja arendustegevuse koondhinnang 2011.aastal on „5-“ (väga hea).

## 2.7 Instituudi teadus- ja arendustegevuse teemade ja projektide nimetused (*Eesti Teadusinfosüsteemi, edaspidi ETIS, andmetel*)

- Haridus- ja Teadusministeerium

sihtfinantseeritavad teemad:

- T719, Tehnoloogiliste protsesside intensiivistamine aktuaalsete keskkonnaprobleemide lahendamiseks, Munter Rein
- T022, Keemiatehnilised aspektid keskkonnariskide hindamisel, Oja Vahur

baasfinantseerimise toetusfondist rahastatud projektid (sh TTÜ tippkeskused):  
riiklikud programmid:

- Teiste ministeeriumide poolt rahastatavad riiklikud programmid:

- Uuriija-professori rahastamine:

- SA Eesti Teadusfond

grandid:

- ETF7812, Klooritud süsivesinikega saastatud pinnase taastamine peroksüdeerimisega, Goi Anna
- ETF8186, Esiletulevate orgaaniliste mikrosaasteainete eemaldamine veest/reoveest täiustatud Fenton-protsessidega, Trapido Marina

ühisgrandid välisriigiga:

- GUS10, Fotokatalüüsi kombinatsioon fermentatsiooniga vesilahustest vesiniku ja hapniku tootmiseks, Klauson Deniss

järeldoktorite grandid (SA ETF ja Mobilitas):

tippeadlase grandid (Mobilitas):

- Ettevõtluse Arendamise SA

eeluuringud:

arendustoetused:

- SA Archimedesega sõlmitud lepingud

infrastruktuur (nn „mini-infra“, „asutuse infra“):

- AP719, Keskkonnatehnoloogiliste protsesside intensiivistamine aktuaalsete keskkonnaprobleemide lahendamiseks, Munter Rein

Eesti tippkeskused:

riiklikud programmid:

- AR10129, Põlevkivitehnoloogiate arendustöodes vajalike ainesüsteemide termodünaamilised omadused: eksperimentaalne ja arvutuslik määramine ning määramisvõimaluste parendamine, Vahur Oja

muud T&A lepingud:

- SA Keskkonnainvesteeringute Keskusega sõlmitud lepingud:
  - Siseriiklikud lepingud:
    - Lep10042, AS Narva Elektri jaamad Õlitehase tehnoloogilise protsessiga seonduvad keemilis-tehnilised uuringud keskkonda kahjustavate tegurite vähendamiseks tootmisprotsessis ja uttesaadustes 2010, Oja Vahur
    - Lep11030, AS Narva Elektri jaamad Õlitehase tehnoloogilise protsessiga seonduvad keemilis-tehnilised uuringud keskkonda kahjustavate tegurite vähendamiseks tootmisprotsessis ja uttesaadustes 2011, Oja Vahur
  - EL Raamprogrammi projektid:
  - Välisriiklikud lepingud:

**2.8** Struktuuriüksuse töötajate poolt avaldatud sihtfinantseeritava teadusteema taotlemisel arvestatavad eelretsenseeritavad teaduspublikatsioonid (*ETIS klassifikaatori alusel 1.1, 1.2, 1.3, 2.1, 2.2, 3.1, 3.2, 3.3, 4.1 ja 5.1*).

### 1.1

Järvik, O.; Viioja, A.; Kamenev, S.; Kamenev, I. (2011). Activated sludge process coupled with intermittent ozonation for sludge yield reduction and effluent water quality control. *Journal of Chemical Technology and Biotechnology*, 86(7), 978 - 984.

Dulova, N.; Trapido, M. (2011). Application of Fenton's Reaction for Food-processing Wastewater Treatment. *Journal of Advanced Oxidation Technologies*, 14(1), 9 - 16.

Viisimaa, M.; Veressinina, J.; Goi, A. (2011). Aroclor 1016 contaminated soil treatment by hydrogen peroxide: laboratory column study. *Environmental Technology*, xx - xx. [ilmumas]

Dulova, N.; Trapido, M.; Dulov, A. (2011). Catalytic degradation of picric acid by heterogeneous Fenton-based processes. *Environmental Technology*, 32(4), 439 - 446.

Dulov, A.; Dulova, N.; Trapido, M. (2011). Combined Physicochemical Treatment of Textile and Mixed Industrial Wastewater. *Ozone: Science & Engineering*, 33(4), 285 - 293.

Goi, A.; Viisimaa, M.; Karpenko, O. (2011). DDT-Contaminated Soil Treatment with Persulfate and Hydrogen Peroxide Utilizing Different Activation Aids and the Chemicals Combination with Biosurfactant. *Journal of Advanced Oxidation Technologies*, xx - xx. [ilmumas]

Jõks, S.; Krichevskaya, M.; Preis, S. (2011). Gas-phase photocatalytic oxidation of acrylonitrile on sulphated TiO<sub>2</sub>: continuous flow and transient study. *Catalysis Letters*, 141(2), 309 - 315.

Goi, A.; Viisimaa, M.; Trapido, M.; Munter, R. (2011). Polychlorinated Biphenyls-Containing Electrical Insulating Oil Contaminated Soil Treatment with Calcium and Magnesium Peroxides. *Chemosphere*, 82(8), 1196 - 1201.

Krichevskaya, M.; Klauson, D.; Portjanskaja, E.; Preis, S. (2011). The cost evaluation of advanced oxidation processes in laboratory and pilot-scale experiments . *Ozone: Science & Engineering*, 33, 211 - 223.

## 1.2

Dulov, A.; Dulova, N.; Veressinina, Y.; Trapido, M. (2011). Degradation of propoxycarbazone-sodium with advanced oxidation processes. *Water Science and Technology: Water Supply*, 11(1), 129 - 134.

## 1.3

### 2.1

### 2.2

### 3.1

### 3.2

Dulov, A.; Dulova, N.; Veressinina, Y.; Trapido, M. (2011). Application of advanced oxidation technologies for propoxycarbazone-sodium degradation. In: *Ozone and UV Leading-Edge Science and Technologies : 20th IOA World Congress - 6th IUVA World Congress*, Paris, France, 23-27 May. (Toim.) The International Ozone Association and The International Ultraviolet Association., 2011, I.6.15-1 - I.6.15-8.

Epold, I.; Barajeva, P.; Veressinina, Y.; Trapido, M. (2011). Degradation of emerging pharmaceuticals in water/wastewater matrix with advanced oxidation processes: a comparative study. In: *Proceedings of 20th IOA World Congress - 6th IUVA World Congress "Ozone and UV Leading-Edge Science and Technologies"* , Paris, France, 23-27 May: The International Ozone Association and The International Ultraviolet Association, 2011, VIII.2.6-1 - VIII.2.6-10.

Viisimaa, M.; Veressinina, J.; Goi, A. (2011). Enhanced Degradation of Polychlorinated Biphenyls in Soil by Hydrogen Peroxide, Persulfate and Ozone. In: *Ozone and UV Leading-Edge Science and Technologies: 20th IOA World Congress - 6th IUVA World Congress*, Paris, France, 23-27 May. (Toim.) The International Ozone Association and The International Ultraviolet Association ., 2011, 1.5.10-1 - 1.5.10-10.

Järvik, O.; Saarik, V.; Osadchuk, I.; Viiroja, A; Kamenev, I. (2011). Influence of Activated Carbon on Ozonation of Phenolic Wastewater. In: *Proceedings of 20th IOA World Congress - 6th IUVA World Congress "Ozone and UV Leading-Edge Science and Technologies"* , Paris, France, 23-27 May: The International Ozone Association and The International Ultraviolet Association, 2011, VIII.2.11-1 - VIII.2.11-9.

Goi, A.; Viisimaa, M.; Trapido, M. (2011). Peroxidation for remediation of chlorinated hydrocarbons contaminated soil. *FCES' 2011, Finnish Conference of Environmental Science*, Turku, Finland, 5-6 May, 2011. (Toim.) Brozinski, J.-M.; Brozonski, A.; Kronberg, L.. Åbo Akademi University Printing Press, 2011, 29 - 32.

Munter, R. (2011). Static mixers for ozonation of water. In: *Proceedings of the 20th IOA World Congress - 6th IUVA World Congress: 20th IOA World Congress - 6th IUVA World Congress*, 23-27 May 2011, Paris, France. , 2011, 502 - 518.

3.3

4.1

5.1

5.2

Jöks, S.; Klauson, D.; Krichevskaya, M.; Preis, S.; Moiseev, A.; Qi, F.; Deubner, J.; Weber, A. (2011). Gas-phase photocatalytic activity of nanostructured titanium dioxide from diffusion flame synthesis. *In: Abstracts: Photocatalytic and advanced oxidation technologies for treatment of water, air, soil and surfaces (PAOT)*, July 4-8, 2011, Gdansk, 62.

Savest, N.; Oja, v. (2011). Heat capacities of kukersite oil shale in comparison with available data of other oil shales. 19th European Conference on Thermophysical Properties, Thessaloniki, Greece, August 28-September 1. , 2011, 287.

**2.9** Struktuuriüksuses kaitstud doktoriväitekirjade loetelu (*NB! struktuuriüksus lisab struktuuriüksuse töötaja juhendamisel mujal kaitstud doktoriväitekirjade loetelu*)

**Oliver Järvik**, keemiatehnika instituut

Teema: *Intensification of Activated Sludge Process - the Impact of Ozone and Activated Carbon* (Aktiivmudaprotsessi intensiivistamine - osooni ja aktiivsöe mõju)

Juhendaja: dotsent Inna Kamenev

Kaitses: 10.06.2011

Omistatud kraad: filosoofiadoktor (keemia- ja materjalitehnoloogia)

**Mariliis Sihtmäe**, keemiatehnika instituut

Teema: *(Eco)Toxicological Information on REACH-Relevant Chemicals: Contribution of Alternative Methods to in Vivo Approaches* (Alternatiivsed lähenemisviisid in vivo meetoditele (öko)toksikoloogilise teabe kogumisel REACH-kemikaalide kohta)

Juhendaja: emeriitprof Rein Munter

Kaasjuhendaja: vanemteadur Anne Kahru

Kaitses: 25.11.2011

Omistatud kraad: filosoofiadoktor (keemia- ja materjalitehnoloogia)

**2.10** Struktuuriüksuses järeldoktorina T&A-s osalenud isikute loetelu (*ETIS-e kaudu esitatud taotluste alusel*)

**2.11** Struktuuriüksuses loodud tööstusomandi loetelu

### **3. Struktuuriüksuse infrastruktuuri uuendamise loetelu**

- Refraktomeeter Abbemat WR/HT, 27.05.2011, 12 300 €
- Tihedusemõõtja DMA5000 M, 27.05.2011, 15 610 €
- Auruõhu mõõtur, 6.06.2011, 11 799 €
- Vaakumpump HiCube 80 Eco, 13.06.2011, 3 700 €
- Lämmastiku generaatori kompl., 5.07.2011, 11 896 €
- Modulaarne reomeeter, 20.09.2011, 38 990 €
- Kalorimeeter (kõrgrõhu, dife-, 4.10.2011, 91 000 €
- Optiline tensiometer Model 260, 7.10.2011, 17 983 €
- Kuumutatav sisend tiheduse-, 14.10.2011, 2 523 €



- Jahutusseade Huber CC 250, 20.10.2011, 2 630 €
- Labor.soojusjuhtivuse mõõtur, 19.12.2011, 23 731 €
- Laborat.viskosimeeter, 19.12.2011, 19 524 €