

KEEMIA- JA MATERJALITEHNOLOOGIA TEADUSKOND
KEEMIASTEHNIKA INSTITUUT
TEADUS- JA ARENDUSTEGEVUSE AASTAARUANNE 2013

1. Instituudi struktuur

Keemiatehnika instituut, Department of Chemical Engineering
Instituudi direktor 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. struktuuriüksuse koosseisu kuuluvate uurimisgruppide

2.1 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

The research group is engaged in the studies 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.).

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

Keemiatehnika uurimisgrupp

A newly developed DSC based technique was applied to determine quantitatively absorbed solvent in the swollen matrixes - for oil shale kerogen and its thermobitumen based matrixes. Vapor pressure and heats of vaporization data on pure compounds and oil shale based liquids/oils were measured. Other basic thermodynamic properties (such as viscosity, boiling point, molecular weight, molecular weight distribution, surface tension) of Estonian kukersite oil shale oil fractions were investigated experimentally.

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, acrylic acid, aromatic toluene and styrene mixtures to evaluate the gas-phase photocatalytic activity of a TiO_2 nanopowder synthesized in a flame aerosol reactor.

Keskkonnakaitse ja keemiatehnoloogia uurimisgrupp

In 2013 the activities of the research were focused on the implementation of two research projects. One of them (CHEMBIO financed by KESTA program) is implemented in cooperation with researchers from University of Tartu and aims to elaborate appreciated combined physico-chemical-biological treatment schemes for several kind of wastewater containing recalcitrant organics. The combined treatment schemes for the treatment of five different wastewater types with high content of recalcitrant organics have been studied and each stage of the treatment optimized at laboratory scale. Another project “Chemical engineering approach to removal of priority pollutants and emerging micropollutants from water/wastewater and soil: implementation and optimization of advanced oxidation technologies” (IUT1-7 financed by ETAG) aims to extend advanced oxidation technologies (AOTs) application to environment protection from priority pollutants and emerging micropollutants. The improvement the efficiency of micropollutants will be achieved by introducing novel oxidants, catalysts and renewable energy sources (solar radiation) to power the process. The chemical engineering approach to optimisation of processes will be used. The studies in year 2014 cover the application of AOTs for destruction nonylphenol, photocatalytic oxidation of doxycycline and prednisolone, and chemical (with novel oxidants)–biological treatment of PCB-contaminated soil.

2.3 Uurimisgrupi kuni 5 olulisemat publikatsiooni aruandeaastal.

Keemiatehnika uurimisgrupp

Moiseev, A.; Krichevskaya, M.; Qi, F.; Weber, A. P.; Deubener, J. (2013). Analysis of photocatalytic performance of nanostructured pyrogenic titanium dioxide powders in view of their polydispersity and phase transition: critical anatase particle size as a factor for suppression of charge recombination. *Chemical Engineering Journal*, 228, 614 - 621.

Klauson, D.; Pilnik-Sudareva, J.; Pronina, N.; Budarnaja, O.; Krichevskaya, M.; Käkinen, A.; Juganson, K.; Preis, S. (2013). Aqueous photocatalytic oxidation of prednisolone. *Central European Journal of Chemistry*, 11(10), 1620 - 1633.

Hruljova, J.; Savest, N.; Oja, V.; Suuberg, E. (2013). Kukersite oil shale kerogen solvent swelling in binary mixtures. *Fuel*, 105, 77 - 82.

Keskkonnakaitse ja keemiatehnoloogia uurimisgrupp

Klauson, D.; Poljakova, A.; Pronina, N.; Krichevskaya, M.; Moiseev, A.; Dedova, T.; Preis, S. (2013). Aqueous photocatalytic oxidation of doxycycline. *Journal of Advanced Oxidation Technologies*, 16(2), 234 - 243.

Viisimaa, M.; Karpenko, O.; Novikov, V.; Trapido, M.; Goi, A. (2013). Influence of biosurfactant on combined chemical–biological treatment of PCB-contaminated soil. *Chemical Engineering Journal*, 220, 352 - 359.

Dulov, A.; Dulova, N.; Trapido, M. (2013). Photochemical degradation of nonylphenol in aqueous solution: The impact of pH and hydroxyl radical promoters. *Journal of Environmental Sciences*, 25(7), 1326 - 1330.

Klassifikaator 3.2 järgi ilmus 5 artiklit, 5.1. järgi 3 artiklit ja 5.2. järgi ilmus 7 artiklit.

3. Loetelu struktuuriüksuse töötajate rahvusvahelistest tunnustustest.

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 -

Rahvusvahelise Osooni Assotsiatsioon (IOA) nõukogu liige

Rahvusvahelise Vee Assotsiatsiooni (IWA) liige

5. Soovi korral aruandeaastal saadud T&A-ga seotud tunnustused, ülevaade teaduskorralduslikust tegevusest, teadlasmobiilsusest ning anda hinnang oma teadustulemustele.

5.1 Teaduskorralduslik tegevus

Prof Vahur Oja

Ajakirja "Oil Shale" nõuandva kolleegiumi liige

TTÜ Keemia- ja materjalitehnoloogia teaduskonna teadusprodekaan, nõukogu liige

TTÜ Keemia- ja materjalitehnoloogia teaduskonna nõukogu õppekavakomisjoni liige

Eesti Keemia Seltsi juhatuse liige

Prof Marina Trapido

TTÜ Keemia- ja materjalitehnoloogia teaduskonna nõukogu liige

Emeriitprof Rein Munter

Ajakirja "Water Chemistry and Technology" toimetuse liige

Emeriitprof Valdek Mikkal -

Eesti Keemia Seltsi juhatuse liige

5.2 Teadlasmobiilsus

Professor Vahur Oja

Osalemine European Federation of Chemical Engineering, Working Party on Thermodynamics and Transport Properties töögrupi koosolekul, Frankfurt, Saksamaa, 18.aprill -20.aprill 2013.

Plenaarettekannet ja osalemine: XIX International Conference on Chemical Thermodynamics in Russia, Moscow State University Moscow, 24. juuni -28 juuni, 2013.

Kohtumised University of Richmond, Richmond VA, USA 02.- 07. september 2013.

Kutsutud ettekannet konverentsil 246th ACS National Meeting & Exhibition 2013 Indianapolis, Indiana, USA , 08-12 september 2013.

Professor Marina Trapido

Osalemine konverentsil: 3rd European Conference on Environmental Applications of Advanced Oxidation Processes, Almeria, Hispaania 27-30 oktoober 2013

Vanemteadur M. Kritsevskaja

Posterettekanne 245th American Chemical Society (ACS) National Meeting & Exposition, Chemistry and applications of advanced oxidation processes for removal of contaminants of emerging concern, New Orleans, Louisiana, USA, aprill 7 – 11, 2013.

Posterettekanne konverentsil :4th International Conference on Semiconductor Photochemistry, Praha, Tšehhi, 23-27. juuni 2013.

Vanemteadur Deniss Klauson

Posterettekanne 245th American Chemical Society (ACS) National Meeting & Exposition, Chemistry and applications of advanced oxidation processes for removal of contaminants of emerging concern, New Orleans, Louisiana, USA, aprill 7 – 11, 2013.

Vanemteadur Anna Goi

Välisdoktorandi stažeerimise juhendaja, Eva Kokosova, Technical University of Liberec, Liberec Tšehhi Vabariik, DoRa program tegevus 6 (Archimedes AS). Liitus keskkonnakaitse ja keemiatehnoloogia uurimisgrupiga septembris 2012.a ja jätkas uurimistööd kuni 2013. a juunikuuni lõpuni.

Doktorant Marika Viisimaa

Ettekanne TÜ ja TTÜ doktorikooli “Funktsionaalsed materjalid ja tehnoloogiad” teaduskonverentsil, Tallinn, 07-08 märts 2013.

Ettekanne International Conference EA3G2013, Wasser Berlin International Trade Fair and Congress, Berliin, Saksamaa, 23-24 aprill 2013.

Ettekanne 3rd European Conference on Environmental Applications of Advanced Oxidation Processes, Almeria, Hispaania, 27-30 oktoober 2013.

Doktorant Jelena Hruljova

Ettekanne 11th Mediterranean Conference of Calorimetry and Thermal Analysis (MEDICTA 2013). Athens, Greece. 12–14.06.2013.

Suvekool 1st Summer Training School on Thermal Analysis. From Theory to practice. Athens, Greece, 15.juuni 2013.

5.3 Hinnang oma teadustulemustele

Tuleb esiletõsta SA Archimedes sõlmitud lepingutega riiklike programmide raames läbiviidavate projektide :

AR10129, Energiatehnoloogia ,Põlevkivitehnoloogiate arendustöodes vajalike ainesüsteemide termdünaamilised omadused: eksperimentaalne ja arvutuslik määramine ning määramisvõimaluste parendamine, professor Vahur Oja (1.01.2011 - 31.12.2014);

AR12060, Keskkonnatehnoloogia,Radionukliidide põhjaveest eraldamise tehnoloogia optimeerimine, tekkivate radioaktiivsete jäätmetüüpide ja koguste väljaselgitamine ning veepuhastusjaama kiirgusriskide hindamine, vanemteadur Anna Goi (1.01.2012 - 31.08.2015);

AR12017, KESTA,Bioloogiliselt raskesti lagunevate ainete kõrvaldamine reoveest füüsikaliskemiliste ja bioloogiliste meetoditega vesikeskkonna saastekoormuse vähendamiseks (CHEMBIO), professor Marina Trapido (1.01.2012 - 21.12.2014)

ja sihtfinantseeritavate teemade

T022, Keemiatehnilised aspektid keskkonnariskide hindamisel, professor Oja Vahur (01.01.2010 – 31.12.2015)

IUT 107, Keemiatehnikapõhine lähenemisviis prioriteetsete saasteainete ja uute esilekerkivate mikrosasteainete kõrvaldamisele veest/reoveest ja pinnasest: täiustatud oksüdatsioonitehnoloogiate kasutamine ja optimeerimine, professor Marina Trapido (01.01.2013 – 31.12.2018) edukust.

Edukas oli koostöö Eesti Energia Õlitööstus ASga. 2013. Sõlmiti uus leping „AS Narva Elektri jaamad Õlitehase tehnoloogilise protsessiga seonduvad keemilis-tehnilised uuringud keskkonda kahjustavate tegurite vähendamiseks tootmisprotsessis ja uttesaadustes 2013“

Teadustegevuse osas on instituut täitnud oma funktsiooni.

Edukalt on jätkunud magistri ja doktoritööde juhendamine, instituudil oli 12 doktoranti. Teaduspublikatsioone ja konverentsidel peetud ettekandeid oli küllaldaselt, jooksvad uurimisprojektid koos partneritega on ootuspäraselt edasi arenenud.

TTÜ keemiatehnika instituudi teadus- ja arendustegevuse koondhinnang 2013.aastal on „5-“ (väga hea).