

Oznaka poročila: ARRS-RPROJ-ZP-2014/23



## ZAKLJUČNO POROČILO RAZISKOVALNEGA PROJEKTA

## A. PODATKI O RAZISKOVALNEM PROJEKTU

## 1. Osnovni podatki o raziskovalnem projektu

<b>Šifra projekta</b>	J1-3604
<b>Naslov projekta</b>	Napredni materiali za shranjevanje toplotne energije
<b>Vodja projekta</b>	3373 Venčeslav Kaučič
<b>Tip projekta</b>	J Temeljni projekt
<b>Obseg raziskovalnih ur</b>	8430
<b>Cenovni razred</b>	B
<b>Trajanje projekta</b>	05.2010 - 04.2013
<b>Nosilna raziskovalna organizacija</b>	104 Kemijski inštitut
<b>Raziskovalne organizacije - soizvajalke</b>	
<b>Raziskovalno področje po šifrantu ARRS</b>	1 NARAVOSLOVJE 1.04 Kemija 1.04.03 Anorganska kemija
<b>Družbeno-ekonomski cilj</b>	05. Energija
<b>Raziskovalno področje po šifrantu FOS</b>	1 Naravoslovne vede 1.04 Kemija

## B. REZULTATI IN DOSEŽKI RAZISKOVALNEGA PROJEKTA

2. Povzetek raziskovalnega projekta<sup>1</sup>

SLO

Osnovni namen raziskave je razvoj novih sistemov za shranjevanje toplotne energije (za sorpcijsko shranjevanje toplote, ki temelji na reverzibilnem fizikalno-kemijskem procesu: sorpcija / desorpcija vode na poroznih trdnih adsorbentih); to je sinteza in karakterizacija novih sorpcijskih mikroporoznih in mezoporoznih materialov ter študij odvisnosti med strukturo teh materialov ter njihovo zmožnostjo shranjevanja toplotne energije. Glavna vloga sistemov za shranjevanje energije je skrajšati čas ali znižati neusklajeno razmerje med ponudbo in povpraševanjem po energiji. Sončna energija se zdi kot najbolj obetajoč obnovljivi vir energije, vendar bo potrebno rešiti še veliko tehničnih in ekonomskih problemov, preden se bo sončna

energija lahko uporabljala v večjem obsegu. Shrajevanje toplotne energije ostaja med prioritetskimi problemi, še posebej, kadar je govor o dolgoročnem shranjevanju. Razvoj učinkovitih in poceni naprav za shranjevanje energije je nujnost, saj je potrebno upoštevati, da bo v prihajajočih letih oskrba z energijo veliko bolj nestabilna kot sedaj. Energija bo večinoma dostopna iz obnovljivih virov, za katere pa so značilna prekinitvena obdobja proizvodnje in razlike med dobavo in uporabo energije. Sorpcijski materiali za shranjevanje toplotne energije, ki smo jih pripravili hidrotermalno, so mikroporozne in mezoporozne trdne snovi in njihovi kompoziti. Mikroporozno in mezoporozno ogrodje smo funkcionalizirali s higroskopičnimi hidrati anorganskih soli, kot je  $\text{CaCl}_2$ , in aktivnimi kovinskimi mesti. Materiale smo karakterizirali s številnimi modernimi inštrumentalnimi tehnikami z namenom določiti njihovo kristalinično strukturo, čistost nastalih faz ter strukturno ureditev mikro/mezoporoznega ogrodja. Raziskali smo tudi termično stabilnost, dinamiko dehidracije ter s tem povezane strukturne spremembe pripravljenih materialov. Določili smo pomembne strukturne lastnosti, kot so specifična površina, urejenost por, porazdelitev dimenzij por, adsorpcijske kapacitete vode ter strukturno in hidrotermično stabilnost. Prav tako smo optimizirali strukture adsorbentov z namenom povečanja gostote shranjene energije (količina shranjene energije na enoto prostornine) in povečanja učinkovitosti shranjevanja (delež energije, ki ga lahko izkoristimo po določenem obdobju shranjevanja glede na prvotno shranjeno energijo) ter sinteze novih materialov z natančno študijo njihovih strukturnih in termokemičnih lastnosti. Raziskave smo razdelili v tri sklope: (1) sinteza hidrofilnih mikroporoznih in mezoporoznih trdnih snovi in njihovih kompozitov, sestavljenih iz poroznega ogrodja in higroskopnih anorganskih soli vgrajenih v pore ogrodja, (2) strukturna karakterizacija sintetiziranih kompozitov in sorpcijskih materialov, (3) študij termokemičnih lastnosti sintetiziranih materialov.

ANG

The main objective of this investigation is a development of a new thermal energy storage system (sorption heat storage, which is based on a reversible physico-chemical process: sorption/desorption of water on porous solid adsorbents), e.g. a synthesis and characterization of novel sorption materials and the study of the dependency between the structure of novel microporous and mesoporous materials and their thermal storage abilities. The main role of energy storage systems is to reduce the time or rate mismatch between energy supply and energy demand. Solar energy seems to be the most promising renewable energy source, but a lot of technical and economic problems have to be solved before large-scale utilization of solar energy can occur. Thermal energy storage remains among the ranks of these problems, especially when talking about long-term storage. Besides, developing efficient and inexpensive energy storage devices is a necessity, when it is admitted that in the coming years, energy supply will be more unstable than in present. Energy will mostly be accessed by renewable energy sources which are mainly characterized by discontinuity of production periods and shift between energy supply and its use. These novel sorption materials, prepared hydrothermally, comprise microporous and mesoporous solids and their composites. Microporous and mesoporous materials functionality has been multiplied by the incorporation of hygroscopic inorganic salt hydrates, such as  $\text{CaCl}_2$  and metal active sites. The modification of microporous and mesoporous matrices has been obtained by the post-functionalization procedures: wet impregnation and deposition. Materials have been characterized by a variety of modern instrumental techniques in order to characterize their crystalline structure, phase purity and microporous and mesoporous structural arrangement within the porous network. Thermal stability, dehydration dynamics and the resulting changes have been also investigated. The important structural characteristics, such as surface area, pore arrangement, pore size distribution, water sorption capacity and hydrothermal with structural stability have been determined. The proposed project is focused on the optimization of the adsorbent design to increase the storage density, defined as energy stored per unit volume, and storage efficiency, defined as the fraction of energy recoverable after the storage period, as well as the synthesis of new materials with detailed study of their structural/thermo chemical properties. The research has been divided: (1) the synthesis of

different hydrophilic microporous and mesoporous solids and their composites, consisting of a microporous and mesoporous network and a hygroscopic inorganic salt impregnated in the pore system for water-based systems, (2) the structural characterization of synthesized composite and sorbent materials and (3) the study of thermo-chemical properties of new materials.

### 3. Poročilo o realizaciji predloženega programa dela na raziskovalnem projektu<sup>2</sup>

Znanje o materialih je predpogoj, od katerega je odvisen razvoj različnih komponent shranjevalnikov. Primeren material lahko shrani energijo brez toplotnih izgub in je sposoben sprostiti to energijo takoj, ko jo potrebujemo. Izbor kriterijev za materiale, uporabne v sorpcijskih napravah upoštevajoč tehnične, ekonomske in ekološke vidike, je naslednji: visoka afiniteta sorbenta do vode, visoka toplotna prevodnost, še posebej pri adsorpciji, visok toplotni prenos od vode do toplotnega izmenjevalca, nizka temperatura aktivacije, okolju varen in nestrupen material, nekorozijski material, dobra termična in kemijska stabilnost pri delovnih pogojih (temperatura, tlak), zmerno delovno območje tlaka brez visokega vakuumu in nizka cena materiala. V okviru predlaganega projekta smo sintetizirali in karakterizirali ter razvijali postopke sinteze in karakterizacije novih sorpcijskih materialov za shranjevanje toplotne energije. Poudarek je bil na študiji vpliva strukturnih značilnosti novih materialov na njihove termične lastnosti. Parametri, ki odločilno vplivajo na gostoto shranjene energije in učinkovitost sistema in, ki so bili obširno proučevani v okviru projekta, so: kemijska sestava adsorpcijskega materiala, ki določa naravo površine materiala (por) in elektrostatska polja v porah, tip/jakost interakcij med vodo in adsorbentom, specifična površina, ki jo določajo velikost in razporeditev por ter velikost in oblika kristalitov, in hidrotermalna stabilnost adsorbenta.

Razvili smo nov mikroporozni aluminofosfatni adsorbent APO-Tric za vodo kot sorpcijski hranilnik toplote za sezonsko shranjevanje toplote, v katerega bi poleti z desorpcijo vode lahko shranili toploto, pozimi pa bi z nadzorovano adsorpcijo vode sproščeno toploto uporabili za ogrevanje. S primerjalno termogravimetrično in kalorimetrično študijo sorpcije vode v aluminofosfatne materiale z majhnimi porami (SAPO-34, AlPO<sub>4</sub>-18 in APO-Tric) smo pokazali, da je formiranje visoko urejenih vodnih klastrov gonilna sila za nenadno sorpcijo vode v ozkem tlačnem območju, kar je potrebno za uporabo v shranjevalnih sistemih oziroma je bistveno za učinkovito shranjevanje toplote. Nastanek klastrov omogočajo hitre in reverzibilne spremembe v koordinaciji ogrodnih (Al) atomov in optimalen premer por. Delovanje aluminofosfatnega adsorbenta je glede na mehanizem sorpcije vode, toploto adsorpcije in hidrotermalno stabilnost, doslej najbolj obetavno med aluminofosfati kot sorpcijskimi materiali za shranjevanje toplote. Študija tega adsorbenta je pokazala, da je maksimalna kapaciteta vode 318 g/kg suhega adsorbenta, adsorpcijska toplota 53,6 kJ/mol in gostota shranjene energije v temperaturnem območju od 40 do 140°C je 240 kWh/m<sup>3</sup>. Ugotovili smo tudi, da je material možno uporabiti tudi za pretvorbo toplotne energije v sistemih toplotnih črpalk. Aluminofosfatno ogrodje smo modificirali z vgradnjo prehodnih kovin z namenom povečati število adsorpcijskih mest. Rezultati so pokazali, da je maksimalna kapaciteta vode višja kot pri istem materialu brez vgrajenih kovin. Pripravili smo mikroporozni natrijev aluminosilikat (zeolit) z gismondinsko strukturo in spreminjali elementno sestavo zeolita z ionsko izmenjavo z Li, Ca in Mg kationi. Študirali smo odvisnost elementne sestave od maksimalne količine adsorbirane vode, ki je pomembna lastnost materiala za shranjevanje toplote. Materiale smo sintetizirali brez prisotnosti organskih strukturnih usmerjevalcev pri 100°C v 1 do 5 ur. Za vhodne komponente smo uporabili surovine, ki se uporabljajo v proizvodnji zeolitov v tovarni Silkem iz Kidričevega. Sintetiziranim produktom smo določili strukturo z rentgensko praškovo difrakcijo, s termogravimetrično analizo vsebnost vode pri sobnih pogojih in z EDX elementno analizo pa določili kemijsko sestavo. Produkto smo poslali v ZAE Bayern v skupino "Heat Storage Systems" za določitev sorpcijske kapacitete vode. Analiza rezultatov je pokazala, da kemijska sestava adsorbentov vpliva na hidrofilitnost materialov, in sicer natrijev aluminosilikat je slabo hidrofilen adsorbent in adsorbira vodo v več stopnjah v širšem območju relativnega tlaka, kar je posledica strukturnih deformacij zeolitnega ogrodja. Litijev aluminosilikat je slabo hidrofilen, bolj hidrofilen je magnezijev aluminosilikat, medtem ko

kalcijev aluminosilikat kaže največjo hidrofilnost. Ker je adsorpcija vode najvišja pri relativnem tlaku večjem od 0.8, je tak material uporaben za razvlaževanje. Ugotovili smo tudi, da je za desorpcijo vode iz teh zeolitov potrebna višja temperatura ( $350^{\circ}\text{C}$ ), zato so ti materiali uporabni za visoko-temperaturno shranjevanje toplote. Adsorbent je hidrotermalno stabilen, kar je pomembno pri uporabi takega materiala za daljše časovno obdobje. Študirali smo tudi mikroporozne natrijeve aluminosilikate s faujasitno strukturo (zeolit NaX) in spreminjali elementno sestavo zeolita NaX s sintezniimi in post-sintezniimi metodami, in sicer z ionsko izmenjavo s kalcijevimi in magnezijevimi kationi ter z depozicijo s higroskopskim kalcijevim kloridom in magnezijevim kloridom. Z depozicijo teh soli smo pripravili kompozitne materiale, kjer je za matrico služil NaX. Študirali smo odvisnost maksimalne sorpcijske kapacitete vode od elementne sestave, ki je pomembna lastnost materiala za shranjevanje toplote. Sintetiziranim produktom smo določili strukturo z rentgensko praškovo difrakcijo, s termogravimetrično analizo smo ocenili vsebnost vode pri sobnih pogojih, medtem ko smo z EDX elementno analizo določili kemijsko sestavo. Produkte smo poslali v ZAE Bayern v skupino "Heat Storage Systems" za določitev specifične shranjevalne kapacitete. Analiza rezultatov je pokazala, da je zeolit NaX dobro hidrofilen material in da material z nižjim molskim razmerjem Si/Al adsorbira več vode pri enakih pogojih. Kalcijevi in magnezijevi izmenjani materiali adsorbirajo več vode v primerjavi z osnovnim NaX materialom. Proučevali smo specifično shranjevalno kapaciteto teh materialov za shranjevanje sončne energije v temperaturnem območju od  $20$  do  $88^{\circ}\text{C}$  in ugotovili, da ima z magnezijem izmenjani material zeolite NaX najvišjo specifično shranjevalno kapaciteto. S pripravo kompozitov smo zvišali kapaciteto vode materialov, kar kaže, da sta glede na kapaciteto vode najprimernejša materiala za shranjevanje toplote. Način priprave teh kompozitov je enostaven, vendar pa taki materiali zaradi velike vsebnosti higroskopskih soli lahko povzročali korozijo, kar bi bilo zelo neugodno za shranjevalnike. Največjo sorpcijsko kapaciteto vode so imeli kompozitni materiali, in sicer  $\text{MgCl}_2 + \text{NaX}$ . Ionsko izmenjani materiali pa korozije ne povzročajo in so hidrotermično stabilni, kar je zelo pomembno pri uporabi takega materiala za daljše časovno obdobje. Poleg mikroporoznih adsorbentov smo razvili tudi dva nova kompozitna sorbenta ( $\text{CaCl}_2$ -FeKIL-2 in  $\text{CaCl}_2$ -SBA-15) za vodo za sorpcijsko shranjevanje sončne toplotne energije, ki sodi med novejšo generacijo hranilnikov toplote. Kompozit je dvokomponentni material, ki je zgrajen iz porozne matrice in anorganske higroskopske soli v porah matrice. Pomembna prednost takega kompozita je možnost kontroliranega spreminjanja njegovih sorpcijskih lastnosti, predvsem sorpcijske kapacitete vode, s spremembo nekaterih dejavnikov. Prvi dvokomponentni material je zgrajen iz mezoporoznega kovinskega silikata kot matrice in kalcijevega klorida kot higroskopske soli, drugi pa iz mezoporoznega silikata in kalcijevega klorida kot higroskopske soli. Prvi kompozit smo pripravili z impregnacijo porozne matrice, drugega pa z depozicijo soli na matrico. Določili smo strukturne, teksturne in adsorpcijske lastnosti. Ugotovili smo, da je sorpcijska kapaciteta vode kompozitnega materiala odvisna od velikosti por matrice, kemijske sestave matrice, količine higroskopske soli v porah in priprave kompozita. Raziskali smo tudi hidrotermično stabilnost, dinamiko dehidracije ter s tem povezane strukturne spremembe pripravljenih materialov. Z vgradnjo higroskopske soli v neurejeno mezoporožno matrico kovinskega silikata se je povečala maksimalna sorpcijska kapaciteta vode za 3x glede na sorpcijsko kapaciteto vode matrice. Te študije adsorpcije vode in hidrotermične stabilnosti so bile narejene v sodelovanju s Fraunhoferjevim Inštitutom za solarne energijske sisteme v Friburgu v Nemčiji. S post-sintezniim postopkom smo pripravili micro-mesoporozni kompozit (Ti-Beta/SBA-15). Hidrofilnosti tega materiala je primerljiva z mezoporožno silikatno matrico SBA-15. Pripravili smo nove porozne kovinsko-organske materiale ter študirali njihovo hidrotermalno stabilnost. Fe-MOF je uporaben za nizko-temperaturno shranjevanje toplote, kar pomeni, da lahko uporabimo sončno energijo za desorpcijo vode. Ugotovili smo, da je ta material glede na mehanizem sorpcije vode, toploto adsorpcije in hidrotermalno stabilnost, doslej najbolj obetaven med MOF materiali kot sorpcijskimi materiali za shranjevanje toplote. Ugotovili smo tudi, da je ta material možno uporabiti tudi za pretvorbo toplotne energije v sistemih toplotnih črpalk. Za ZnMOF material je značilno, da ohranja strukturo med dehidracijsko-hidratijskim procesom vse do  $200^{\circ}\text{C}$ .

Njegova edinstvena lastnost pa je izredna hidrotermična stabilnost, saj ohrani strukturo tudi po 40 ciklih dolgem testiranju pri 75% relativni vlažnosti med temperaturama 40 in 140°C. Pri proučevanju hidrotermične stabilnosti materiala smo ugotovili tudi, da so  $^1\text{H}$  MAS,  $^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$  CPMAS NMR ter IR metode komplementarne tehnike rentgenski praškovni difrakciji nepogrešljive pri preučevanju teh lastnosti. Poleg tega smo ugotovili, da lahko  $^2\text{H}$  MAS NMR in in-situ IR spektroskopijo uporabljamo pri študiju mehanizma adsorpcije in desorpcije vode na MOF materialih. Glede na izredno hidrotermično stabilnost je ZnBTC material primeren kandidat za uporabo v sorpcijskih hranilnikih toplote in tudi pri drugih aplikacijah, kjer je potrebna stabilnost v vlažnih pogojih. Adsorpcijska kapaciteta vode tega MOFa je primerljiva z adsorpcijsko kapaciteto vode zeolita A. Poznavanje razlogov za hidrotermično stabilnost cinkovega karboksilata omogoča nadaljnji razvoj sorodnih materialov s podobno hidrotermično stabilnostjo. Preučevali smo hidrotermalno stabilnost treh aluminijevih benzen-1,3,5-trikarboksilatov (MIL-96(Al), MIL-100(Al) in MIL-110(Al)). Med aluminijevimi benzen-1,3,5-trikarboksilati sta se za izredno stabilna izkazala materiala MIL-96(Al) in MIL-100(Al). Material MIL-100(Al) ima tudi največjo adsorpcijsko kapaciteto vode (0,73 g/g), medtem ko MIL-96(Al) in MIL-110(Al) vežeta 0,33 g oziroma 0,38 g  $\text{H}_2\text{O}$  na gram materiala.

Z dosedanjimi raziskavami smo ugotovili, da na gostoto shranjene energije adsorbentov vplivajo kemijska sestava adsorbenta, njegova specifična površina, ki je odvisna od velikosti in oblike delcev ter urejenega/neurejenega sistema in velikosti por ter hidrotermalne in strukturne stabilnosti materiala. Vse te dejavnike smo kontrolirali s sintetskimi in posintetskimi metodami in z natančno validacijo različnih karakterizacijskih metod.

Razvili smo tudi sintezni postopek za pripravo zeolita NaX in ga prenesli na pol-industrijski nivo v tovarni Silkem v Kidričevem. Prenos iz 250 ml na 1300 l reaktor je bil uspešen. V tovarni so pripravili dobro kristaliničen granuliran zeolit NaX. Možnosti implementacije se že kažejo, saj so se z nami povezali strokovnjaki iz Slovenije in Avstrije, ki sestavljajo sorpcijsko-shranjevalne sisteme na osnovi granuliranega zeolita.

V zadnjih letih je Dr. Alenka Ristić posebno aktivna v IEA združenju, natančneje v *IEA SHC ECES joint Task/Annex 42/24 (2009-2012) and 42/29 (2013-2015) »Compact thermal energy storage material development for system integration«*. Oktobra 2013 je tako organizirala 10.

mednarodno strokovno srečanje v okviru IEA joint SHC ECES Task/Annex 42/29 "Compact Thermal Energy Storage: Material Development for System Integration" na Kemijskem inštitutu. Srečanja se je udeležilo 35 strokovnjakov iz celega sveta.

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

V okviru triletnega raziskovalnega projekta smo v celoti dosegli in celo presegli raziskovalne cilje. Razvili smo več novih obetavnih sistemov za shranjevanje toplotne energije pri nizkih (sončna energija) in srednjih temperaturah (do 350°C), in sicer s sintezo in strukturno karakterizacijo novih sorpcijskih materialov z vodo kot adsorbatom. Tako smo razvili več mikroporoznih adsorbentov (APO-Tric, kovinski aluminofosfati, zeolit NaP in njegovi ionsko-izmenjani analogi ter zeolit NaX in njegovi ionsko-izmenjani Ca- in Mg-analogi), več kovinsko-organskih ogrodnih materialov (MOFov) in več kompozitnih vodnih sorbentov, ki vsebujejo mikroporozna in mezoporozna ogrodja z anorgansko higroskopsko soljo kalcijevega klorida, mezoporozna ogrodja z mikroporoznim zeolitom Ti-Beta in modificirana mezoporozna silikatna ogrodja z vgrajenimi kovinskimi aktivnimi mesti. S temeljitimi raziskavami, ki so temeljile na spektroskopskih metodah, smo določili njihove podrobne strukturne in fizikalno-kemijske lastnosti. S temeljitimi raziskavami, ki so temeljile na spektroskopskih metodah, smo določili njihove podrobne strukturne in fizikalno-kemijske lastnosti. Materiale smo okarakterizirali s številnimi modernimi inštrumentalnimi tehnikami z namenom določiti njihovo kristalinično strukturo, čistost nastalih faz ter strukturno ureditev mikro- in mezoporoznega ogrodja. Raziskali smo tudi hidrotermično stabilnost, dinamiko

dehidracije ter s tem povezane strukturne spremembe pripravljenih materialov. Določili smo še druge pomembne fizikalne lastnosti, predvsem kemijsko sestavo sorbentov, urejenost in karakteristike por, porazdelitev dimenzij por, prisotnost kovinskih aktivnih mest, ter vodne adsorpcijske kapacitete. Prav tako smo optimizirali strukture adsorbentov z namenom povečanja gostote shranjene energije (količina shranjene energije na enoto prostornine), predvsem za shranjevanje sončne energije.

Svoja dognanja in rezultate raziskav smo objavili v treh znanstvenih člankih z IF od 3.4 do 9.8 in več poljudnih člankih, jih predstavili na mednarodnih konferencah kot predavanja in kot postre, imeli vabljen predavanja na konferencah in na tujih univerzah.

Pokazale so se tudi možnosti implementacije, saj so se z nami povezali strokovnjaki iz Slovenije in Avstrije, ki uporabljajo sorpcijsko-shranjevalne sisteme na osnovi granuliranega zeolita.

#### 5. Utemeljitev morebitnih sprememb programa raziskovalnega projekta oziroma sprememb, povečanja ali zmanjšanja sestave projektne skupine<sup>4</sup>

Sprememb projekta niti sestave projektne skupine ni bilo.

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

Znanstveni dosežek		
1.	COBISS ID	4910618
		Vir: COBISS.SI
Naslov	SLO	Uporabnost mikroporoznega aluminofosfata z majhnimi porami pri nizko-temperaturnem shranjevanju sončne energije – odvisnost adsorpcijskih lastnosti od strukture
	ANG	The performance of small-pore microporous aluminophosphates in low-temperature solar energy storage
Opis	SLO	Avtorji smo razvili mehanizem, s katerim lahko predvidimo potencial za shranjevanje toplote za številne znane in nove strukture mikroporoznih materialov. Uporaba reverzibilne kemijske in fizikalne vezave vode v trdne materiale ponuja nov koncept za dolgoročno skladiščenje toplotne energije, tudi v kombinaciji s sončnimi kolektorji, vendar do sedaj ni bilo sistematične študije o možnih mehanizmih za izboljšanje shranjevalnih lastnosti z optimizacijo materialov. S primerjalno termogravimetrično in kalorimetrično študijo sorpcije vode v aluminofosfatne materiale z majhnimi porami (SAPO-34, AIPO4-18 in APO-Tric) smo pokazali, da je formiranje visoko urejenih vodnih klastrov gonilna sila za nenadno sorpcijo vode v ozkem tlačnem območju, kar je potrebno za uporabo v shranjevalnih sistemih oziroma je bistveno za učinkovito shranjevanje toplote. Nastanek klastrov omogočajo hitre in reverzibilne spremembe v koordinaciji ogrodnih aluminijevih atomov in optimalen premer por.
	ANG	The authors have developed a mechanism that predicts the heat storage potential of numerous known or new microporous aluminophosphates. The utilisation of the reversible chemical and physical sorption of water on solids provides a new long-term thermal energy storage concept, also in combination with solar thermal collectors. However, up to now there have been no systematic studies of the possible mechanisms for heat storage enhancement concerning materials optimisation. Based on a comparative thermogravimetric and calorimetric study of water sorption in small-pore aluminophosphate materials (SAPO-34, AIPO4-18 and APO-Tric) the authors proposed that the formation of highly ordered water clusters in the pores is a driving force for a sudden water uptake in a narrow relative pressure range, which is a prerequisite for their use in storage systems and crucially determines their sorption efficiency. The formation of clusters is enabled by rapid and reversible changes in the framework aluminium coordination and optimal pore diameters.

	Objavljeno v	Wiley Interscience; Advanced functional materials; 2012; Vol. 22, iss. 9; str. 1952-1957; Impact Factor: 9.765; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.402; A'': 1; A': 1; WoS: DY, EI, NS, PM, UB, UK; Avtorji / Authors: Ristić Alenka, Zabukovec Logar Nataša, Henninger Stefan K., Kaučič Venčeslav	
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek	
2.	COBISS ID	5034778	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Nov dvokomponentni adsorbent CaCl <sub>2</sub> -FeKIL <sub>2</sub> za vodo za shranjevanje sončne toplotne energije
		ANG	New two-component water sorbent CaCl <sub>2</sub> -FeKIL <sub>2</sub> for solar thermal energy storage
	Opis	SLO	Razvili smo nov dvokomponentni (kompozitni) adsorbent za vodo in za shranjevanje sončne toplotne energije na osnovi sorpcijskega principa. Matrica kompozita je FeKIL <sub>2</sub> material z neurejenimi mezoporami, visoko površino (712 m <sup>2</sup> /g) in velikostjo mezopor od 4 do 29 nm. Kompozit, ki smo ga pripravili z mokro impregnacijo z raztopino kalcijevega klorida, ima manjšo površino 418 m <sup>2</sup> /g in podobno velike mezopore. Maksimalna sorpcijska kapaciteta vode za matrico je 0.21 g/g, medtem ko kompozit kaže trikrat višjo maksimalno sorpcijsko kapaciteto vode zaradi prisotnosti higroskopske soli v matrici. Adsorpcijska toplota za kompozit je 50.4 kJ/mol. Ciklični test (20 ciklov) med temperaturama od 150°C do 40°C pri tlaku vodne pare 5.6 kPa potrjuje relativno dobro hidrotermično stabilnost kompozita.
		ANG	A new two-component (composite) water sorbent CaCl <sub>2</sub> -FeKIL <sub>2</sub> has been developed for sorption-based solar thermal energy storage. The matrix of the composite is FeKIL <sub>2</sub> material with disordered mesopores, high surface area of 712 m <sup>2</sup> /g and mesopore dimensions between 4 and 29 nm. The composite, prepared by wet impregnation of FeKIL <sub>2</sub> with CaCl <sub>2</sub> , has lower surface area (418 m <sup>2</sup> /g) and similar mesopore dimensions as the matrix. The maximum water sorption capacity of FeKIL <sub>2</sub> is 0.21 g/g, while the composite possesses 3 times higher maximum water sorption capacity due to the presence of the salt in the matrix. Heat of adsorption of the composite is 50.4 kJ/mol. A short-term cycling test between temperatures of 150 and 40 °C at a water vapour pressure of 5.6 kPa confirms a comparatively good hydrothermal stability of the composite
	Objavljeno v	Elsevier; Microporous and mesoporous materials; 2012; Vol. 164; str. 266-272; Impact Factor: 3.365; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.402; A': 1; WoS: DW, EI, NS, PM; Avtorji / Authors: Ristić Alenka, Maučec Darja, Henninger Stefan K., Kaučič Venčeslav	
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek	
3.	COBISS ID	5277722	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Študij hidrotermične stabilnosti in sorpcijskih lastnosti 3-dimenzionalnega cinkovega trimezata
		ANG	Study of hydrothermal stability and water sorption characteristics of 3-dimensional Zn-based trimesate
	Opis	SLO	Hidrotermična stabilnost Zn <sub>2</sub> (BTC)(OH)(H <sub>2</sub> O)•1,67H <sub>2</sub> O materiala je njegova edinstvena lastnost, saj je večina cinkovih karboksilatov nestabilnih že v prisotnosti majhnih količin vode. Dokazali smo, da k temu največ prispevajo vodikove vezi med prostimi molekulami vode in koordinirano vodo na anorganskih verigah ter π-π interakcije med aromatskimi obroči. Proces adsorpcije in desorpcije vode smo poleg merjenja vodnih izoterm spremljali tudi z in situ NMR in IR spektroskopijo.
			Hydrothermal stability of Zn <sub>2</sub> (BTC)(OH)(H <sub>2</sub> O)•1.67H <sub>2</sub> O is its unique property, since almost all zinc carboxylates are unstable even in the

		presence of water in traces. We showed that the reason for high chemical stability towards water lay in the presence n-n interaction between aromatic rings and in the fact that inorganic chains are stabilized by strong hydrogen-bonds between coordinated water in ZnO <sub>4</sub> (OH)(H <sub>2</sub> O) units and free water molecules located between the vertices of octahedra. The adsorption and desorption processes were monitored by in situ NMR and IR spectroscopy.
	ANG	
Objavljeno v		American Chemical Society; The journal of physical chemistry; 2013; Vol. 117, iss. 28; str. 14608-14617; Impact Factor: 4.814; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.402; A': 1; WoS: EI, NS, PM; Avtorji / Authors: Birsa Čelič Tadeja, Mazaj Matjaž, Mali Gregor, Rangus Mojca, Čendak Tomaž, Kaučič Venčeslav, Zabukovec Logar Nataša
Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek
4.	COBISS ID	4977690
		Vir: COBISS.SI
Naslov	SLO	Dvokomponentni vodni sorbent za termo-kemijsko shranjevanje energije - vloga porozne matrice
	ANG	Two-component water sorbents for thermo-chemical energy storage - a role of the porous matrix
Opis	SLO	Z mokro impregnacijo smo pripravili dvokomponentni vodni adsorbent iz urejene mezoporozne matrice in kalcijevega klorida. Kompozit ima urejeno mezoporozno strukturo s 2Dheksagonalno ureditvijo por in ohrani strukturo po mokri impregnaciji z raztopino kalcijevega klorida. Urejen kompozitni adsorbent in matrica adsorbirata veliko količino vode. Urejen kompozitni adsorbent je slabo hidrofilen. Za izboljšanje hidrofilitnosti tega kompozita je potrebna večja količina kalcijevega klorida. Za aplikacije za adsorpcijsko shranjevanje toplote je ta material še vedno preveč hidrofoben, ker pride do največje adsorpcije šele pri relativnem tlaku nad 0.6. Kljub temu pa je mokra impregnacija povzročila uspešno spremembo izoterme pri nižjem relativnem tlaku. Še posebej, ker se je povprečen volumen materiala zaradi impregnacije spremenil le malo. To je prvi obetajoč korak, ki kaže na uspešen princip priprave dvokomponentnega adsorbenta za vodo.
	ANG	Two-component water sorbent with mesoporous ordered matrix and calcium chloride was prepared by wet impregnation. The composite has ordered mesoporous structure with 2D-hexagonal pore arrangement and maintain its structure after the wet impregnation with calcium chloride solution. The ordered two-component water adsorbent and the matrix reveal high water uptakes. The ordered two-component composite is rather low hydrophilic adsorbent. For significant improvement of the hydrophilic character higher amount of calcium chloride in the matrix is needed. At present the composite for the application within adsorption heat storage is still too hydrophobic, since the major water uptake occurs only at relative pressure above 0.6. However, by wet impregnation, a successful shift of the isotherm to lower relative pressure was achieved. Since the overall volume was only slightly reduced by the impregnation, this is the first promising step which shows the principle possibility towards further optimization of this two-component water sorbent material.
Objavljeno v		GREA Innovació Concurrent, University of Lleida; The 12th International conference on energy storage; 2012; 7 str.; Avtorji / Authors: Ristić Alenka, Henninger Stefan K., Kaučič Venčeslav
Tipologija		1.08 Objavljeni znanstveni prispevek na konferenci
5.	COBISS ID	4507674
		Vir: COBISS.SI
Naslov	SLO	Novi adsorpcijski material za shranjevanje toplotne energije
	ANG	Novel adsorption material for thermal energy storage



Opis	SLO	Aluminofosfatni material APO-tric je novi adsorpcijski material za shranjevanje toplotne energije. APO-tric ima mikroporozno triklinško kabazitno strukturo z urejenimi tridimenzionalnimi kanali. Ogrodje je zelo fleksibilno, kar povečuje možnost adsorpcije vode v strukturo. Adsorpcija vode deformira kabazitno strukturo. Deformacija je popolnoma reverzibilna in se jo lahko odstrani z dehidratacijo pri 120C. Material je temperaturno stabilen do 900C in ima visoko adsorpcijo vode: 0.32 g vode na 1 g materiala.
	ANG	Aluminophosphate APO-tric is a novel adsorption material for thermal energy storage. APO-tric is a microporous triclinic chabazite material with ordered microporous 3-dimensional channel structure. The framework is very flexible which increases the possibility of water adsorption into the structure. During adsorption of water molecules the chabazite structure is modified. This deformation is however completely reversible and can be eliminated by dehydration at 120°C. The material shows a very good thermal stability up to 900°C and a water adsorption capacity up to 0.32 g/g.
Objavljeno v	ISES; Proceedings; 2010; 5 str.; Avtorji / Authors: Ristić Alenka, Henninger Stefan K., Kaučič Venčeslav, Zabukovec Logar Nataša	
Tipologija	1.08 Objavljeni znanstveni prispevek na konferenci	

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

Družbeno-ekonomski dosežek			
1.	COBISS ID	266498048	Vir: COBISS.SI
Naslov	SLO	Razvoj poroznih kovinsko-organskih adsorbentov za shranjevanje plinov in toplote	
	ANG	Development of metal-organic framework adsorbents for gas and heat storage	
Opis	SLO	Dr. Tadeja Birsa Čelič je v okviru svoje doktorske naloge preučevala kovinsko-organske porozne materiale, to je kristalinične materiale zgrajene iz kovinskih oksidnih enot, ki so med sabo povezane z organskimi ligandi. Za te materiale so značilne izredno velike specifične površine in nizke gostote, zaradi česar so zelo zanimivi za shranjevanje vodika, shranjevanje in ločevanje ogljikovega dioksida in metana ter za shranjevanje energije.	
	ANG	Dr. Tadeja Birsa Čelič studied metal-organic porous materials, e.g. crystalline materials built of metal oxide units, which are each connected with organic ligands, in the scope of her doctoral thesis. Their characteristics like an extremely large specific surface area and low density makes these materials very interesting for hydrogen storage, the storage and separation of carbon dioxide and methane, as well as for energy storage.	
Šifra	D.09 Mentorstvo doktorandom		
Objavljeno v	[T. B. Čelič]; 2013; [XXII], 127 str.; Avtorji / Authors: Birsa Čelič Tadeja		
Tipologija	2.08 Doktorska disertacija		
2.	COBISS ID	5184282	Vir: COBISS.SI
Naslov	SLO	Shranjevanje toplote v poroznih materialih	
	ANG	Heat storage in porous materials	
Opis	SLO	V vabljenem predavanju so bili najprej predstavljeni osnovni koncepti shranjevanja toplote, s poudarkom na sorpcijskem shranjevanju toplote. V nadaljevanju so bili podani primeri študij shranjevanja toplote v aluminofosfatnih in kovinskoorganskih poroznih materialih.	

		ANG	In an invited lecture, the basic concepts of heat storage, with emphasis on the sorption heat storage, were first presented. Then, some examples of the study of heat storage performance in some aluminophosphate and metalorganic porous materials were shown.
Šifra	B.04 Vabljeno predavanje		
Objavljeno v	[s. n.]; 1st Euro - Asia Zeolite Conference; 2013; Str. 21; Avtorji / Authors: Zabukovec Logar Nataša		
Tipologija	1.06 Objavljeni znanstveni prispevek na konferenci (vabljeno predavanje)		
3.	COBISS ID	5314074	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Obetajoči kompozitni vodni sorbenti za shranjevanje sončne energije
		ANG	Promising water sorbent composite materials for solar thermal energy storage
	Opis	SLO	Z mokro impregnacijo z raztopino kalcijevega klorida sta bila pripravljena dva različna sorpcijska kompozita za vodo, eden z neurejeno mesostruktarno matrico iz železovega silikata, drugi pa z urejeno mezoporozno slikatno matrico. Njune strukturne in vodne sorpcijske lastnosti so bile predstavljene na mednarodnem simpoziju 5th International Symposium Advanced Micro- and Mesoporous Materials v Varni 2013.
		ANG	Two different water sorbent composites, one with disordered mesostructured iron silicate matrix and the other with ordered mesoporous silicate matrix together with calcium chloride were presented. The composites were prepared by wet impregnation of disordered mesoporous iron silicate and ordered mesoporous silicate with aqueous solution of calcium chloride. Structural and water sorption properties of both composites were presented at 5th International Symposium Advanced Micro- and Mesoporous Materials in Varna 2013.
	Šifra	B.03 Referat na mednarodni znanstveni konferenci	
	Objavljeno v	[s. n.]; Advanced micro- and mesoporous materials; 2013; Str. 55; Avtorji / Authors: Ristić Alenka, Henninger Stefan K., Kaučič Venčeslav	
	Tipologija	1.12 Objavljeni povzetek znanstvenega prispevka na konferenci	
4.	COBISS ID	5141786	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Novi hranilniki bodo omogočili trajno segrevanje toplote
		ANG	New storage tanks will enable permanent heat storage
	Opis	SLO	V članku v poslovnem časopisu z najvišjo odmevnostjo v Sloveniji je na poljuden način predstavljeno področje shranjevanja energije, najnovejše tehnologije in lastne raziskave na tem področju, ki so v svetovnem vrhu.
		ANG	In an article in the business newspaper with the highest publicity in Slovenia we presented in a simplified manner the field of energy storage, the latest technology and our own worldleading research in this area.
	Šifra	F.18 Posredovanje novih znanj neposrednim uporabnikom (seminarji, forumi, konference)	
	Objavljeno v	Gospodarski vestnik; Finance; 2012; Št. 163; str. 12-13; Avtorji / Authors: Zabukovec Logar Nataša	
	Tipologija	1.05 Poljudni članek	
5.	COBISS ID	5270298	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Hidrotermalna stabilnost - pomembna značilnost kovinsko-organskih ogrodnih materialov
		ANG	Hydrothermal stability as an important characteristics of metal-organic framework materials

Opis	SLO	Študirali smo hidrotermalno stabilnost treh aluminijevih (MIL-96, MIL-100, MIL-110) in enega cinkovega karboksilata. Med aluminijevimi MOFi, MIL-96 (Al) in MIL-100 (Al), kažeta večjo stabilnost v vodi kot MIL-110 (Al) material, ki je stabilen samo, če je prisotna voda v sledovih. Hidrotermalna stabilnost ZnMOFove strukture je redkost, ki je posledica prisotnosti vodikovih vezi med adsorbirano vodo in ogrodja ter zaradi interakcij n-n med benzenovimi obroči. Vendar pa visoka vodoodbojnost, tudi pri povišanih temperaturah, skupaj z obetavnimi lastnostmi adsorpcije vode (0,7 g vode na gram materiala) pomeni, da je le MIL-100 (Al) material, potencialni kandidat za sorpcijsko shranjevanje energije.
	ANG	We have studied the hydrothermal stability of three aluminium (MIL-96, MIL-100, MIL-110) and one zinc carboxylates. Among aluminium-based MOFs, MIL-96(Al) and MIL-100(Al) show higher stability in water as the MIL-110(Al) material, which is stable only when water is present in traces. Hydrothermal stability of ZnBTC structure is a rarity for Zn-based MOFs and the reason lay in the presence of hydrogen bonds between adsorbed water and the framework and due to the n-n interactions between benzene rings. However, high water resistance even at elevated temperatures together with promising water sorption properties (0.7 g of water per g of material) implies that only MIL-100(Al) material is a potential candidate for water sorption based energy applications.
Šifra	B.03 Referat na mednarodni znanstveni konferenci	
Objavljeno v	Serbian Zeolite Association; Faculty of Physical Chemistry; Proceedings of the 5th Serbian-Croatian-Slovenian Symposium on Zeolites, May, 30 - June, 2, 2013, Zlatibor, Serbia; 2013; Str. 72-75; Avtorji / Authors: Birsa Čelič Tadeja, Mazaj Matjaž, Mali Gregor, Kaučič Venčeslav, Zabukovec Logar Nataša	
Tipologija	1.08 Objavljeni znanstveni prispevek na konferenci	

## 8. Drugi pomembni rezultati projektne skupine<sup>Z</sup>

V okviru IEA Task 42 Annex 24 »Compact Thermal Energy Storage Material Development for System Integration« smo sodelovali z drugimi priznanimi inštituti na področju shranjevanja energije od leta 2009 do 2012. Na srečanjih je dr. Alenka Ristić predstavljala naše rezultate: sintezo in strukturno karakterizacijo materialov, ki smo jih pripravili pri nas in termokemijske lastnosti teh materialov. Od leta 2013 je dr. Ristićeva vodja delovne skupine za Inženiring materialov v okviru IEA joint SHC ECES Task/Annex 42/29 "Compact Thermal Energy Storage: Material Development for System Integration". Od 2.-4. oktobra 2013 je organizirala 10. mednarodno strokovno srečanje v Ljubljani na Kemijskem inštitutu.

Prof. dr. Nataša Zabukovec Logar je imela predavanje o potencialu mikroporoznih aluminofosfatih za shranjevanje toplote na tuji univerzi v CNRS ENSICAEN Caenu v Franciji leta 2012 in v School of Energy and Environment, City University of Hong Kong, Hong Kong, China leta 2013.

Dr. Alenka Ristić je bila somentorica dijakoma Gimnazije Vič pri raziskovalni nalogi z naslovom Zeoliti in shranjevanje toplotne energije. Dijaka sta prejela letos 2 srebrni medalji na I-SWEEEP olimpiadi v Houstonu in na olimpiadi mladih raziskovalcev Genius na področju Science v Oswego, NY, ZDA ter zlato priznanje na 47. državnem tekmovanju mladih raziskovalcev v kategoriji Kemija.

Članek v Financah 5.3.2013 »Gimnazijca, ki želita poceniti ogrevanje v vašem domu« opisuje raziskovalno nalogo z naslovom Zeoliti in shranjevanje toplotne energije, ki sta jo gimnazijca opravljala na Kemijskem inštitutu.

Članek v Delu 29. 9. 2011 »Korak k učinkovitemu shranjevanju toplote« opisuje raziskovalno delo na materialih za shranjevanje toplote.

Dr. Tadeja Birsa Čelič je dobitnica Preglove nagrade za izjemno doktorsko delo v letu 2013, ki jo podeljuje Kemijski inštitut.

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

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

SLO

V Evropi se za ogrevanje prostorov porabi zelo visok delež fosilnih goriv. S tem pa je povezano onesnaževanje ozračja in visoki izpusti CO<sub>2</sub>. Shranjevanje toplotne energije je ključni del vseh novejših sistemov za potrebe ogrevanja in ohlajanja. Razvoj materialov za tehnologije shranjevanja z izboljšanim delovanjem, obstojnostjo in zanesljivostjo sistema ter nižjimi stroški ima pozitiven učinek tudi na razvoj drugih sistemov z obnovljivimi viri energije. Za izboljšanje tehnologij shranjevanja enegije imajo daleč najpomembnejšo vlogo uporabljeni materiali.

V projektu smo se osredotočili na razvoj novih adsorpcijskih materialov in razvoj novih sistemov za shranjevanje toplotne energije (za sorpcijsko shranjevanje toplote, ki temelji na reverzibilnem fizikalno-kemijskem procesu: sorpcija / desorpcija vode na poroznih trdnih adsorbentih); to je sinteza in karakterizacija novih sorpcijskih mikroporoznih in mezoporoznih materialov ter študij odvisnosti med strukturo teh materialov ter njihovo zmožnostjo shranjevanja toplotne energije. Sorpcijski materiali za shranjevanje toplotne energije, ki smo jih pripravili hidrotermalno, so mikroporozne in mezoporozne trdne snovi in njihovi kompoziti. Mikroporozno in mezoporozno ogrodje smo funkcionalizirali s higroskopičnimi hidrati anorganskih soli, kot je CaCl<sub>2</sub>. Materiale smo karakterizirali s številnimi modernimi inštrumentalnimi tehnikami z namenom določiti njihovo kristalinično strukturo, čistost nastalih faz ter strukturo ureditev mikro/mezoporoznega ogrodja. Raziskali smo tudi termično stabilnost, dinamiko dehidracije ter s tem povezane strukturne spremembe pripravljenih materialov. Prav tako smo optimizirali strukture adsorbentov z namenom povečanja gostote shranjene energije in povečanja učinkovitosti shranjevanja.

V okviru triletnega raziskovalnega projekta smo v celoti dosegli in celo presegle raziskovalne cilje. Razvili smo več novih obetavnih sistemov za shranjevanje toplotne energije pri nizkih (sončna energija) in srednjih temperaturah (do 350oC), in sicer s sintezo in strukturo karakterizacijo novih sorpcijskih materialov z vodo kot adsorbatom. Razvili smo nov mikroporozni aluminofosfatni adsorbent APO-Tric za vodo kot sorpcijski hranilnik toplote za sezonsko shranjevanje toplote, v katerega bi poleti z desorpcijo vode lahko shranili toploto, pozimi pa bi z nadzorovano adsorpcijo vode sproščeno toploto uporabili za ogrevanje. S primerjalno termogravimetrično in kalorimetrično študijo sorpcije vode v aluminofosfatne materiale z majhnimi porami (SAPO-34, AIPO4-18 in APO-Tric) smo pokazali, da je formiranje visoko urejenih vodnih klastrov gonilna sila za nenadno sorpcijo vode v ozkem tlačnem območju, kar je potrebno za uporabo v shranjevalnih sistemih oziroma je bistveno za učinkovito shranjevanje toplote. Material je vzbudil precejšnjo pozornost in zato so bili rezultati teh raziskav objavljeni v prestižni reviji Advanced Functional Materials. Sicer smo svoja dognanja in rezultate raziskav objavili v treh znanstvenih člankih z IF od 3.4 do 9.8 in več poljudnih člankih, jih predstavili na mednarodnih konferencah kot predavanja in kot postre ter imeli vabljen predavanja na konferencah in na tujih univerzah.

Zaključeni temeljni projekt ima tudi veliko uporabno vrednost. Razvili smo sintezni postopek za pripravo zeolita NaX in ga prenesli na pol-industrijski nivo v tovarni Silkem v Kidričevem. Prenos iz 250 ml na 1300-litrski reaktor je bil uspešen. V tovarni so pripravili dobro kristaliničen granuliran zeolit NaX. Kažejo se možnosti implementacije, saj so se z nami povezali strokovnjaki iz Slovenije in Avstrije, ki sestavljajo sorpcijsko-shranjevalne sisteme na osnovi granuliranega zeolita.

Od leta 2013 je dr. Rističeva vodja delovne skupine za Inženiring materialov v okviru IEA joint SHC ECES Task/Annex 42/29 "Compact Thermal Energy Storage: Material Development for System Integration".

ANG

For housing heating Europe consumes very high share of fossil fuels. This is related to atmospheric pollution and high CO<sub>2</sub> content. Thermal energy storage is a key part of all newer systems for heating and cooling. Development of materials for storage technologies with improved performance, durability and system reliability, and lower costs has a positive effect on the development of other systems with renewable energy sources. In order to improve storage energy technologies materials used have by far the major role.

In this project, we focused on the development of new adsorption materials and on the development of new systems for thermal energy storage (heat storage is based on reversible physico-chemical process: sorption / desorption of water in porous solid adsorbents). We

focused on hydrothermal synthesis and characterization of new sorption microporous and mesoporous materials and their composites, on the structure of these materials and their ability to store thermal energy. We also functionalized porous structure with hygroscopic hydrates of inorganic salts, such as  $\text{CaCl}_2$ . The materials were characterized with many modern instrumental techniques in order to determine their crystalline structure, phase purity and structural arrangements of micro / mesoporous frameworks. We also studied thermal stability of the materials prepared and dynamics of the dehydration and the related structural changes. We have also optimized the structure of adsorbents in order to increase the density of stored energy and to increase the storage efficiency.

Within a three-year research project we fully achieved and even surpassed the research objectives. We have developed several new promising systems for storing thermal energy at low (solar energy) and medium temperatures (up to 350 deg. C), with the synthesis and structural characterization of new sorption materials with water as adsorption agent. We developed a new microporous aluminophosphate APO-tric adsorbent for seasonal storage of heat in the summer and to release heat in winter via the controlled adsorption/desorption of water. Comparative thermogravimetric and a calorimetric study of sorption of water in the aluminophosphate materials with small pore size (SAPO-34, AIPO4-18 and APO-TRIC) have shown, that the formation of highly ordered water clusters is the driving force for sudden sorption of water in a narrow pressure range, which is required for use in storage systems and is essential for effective heat storage. This material has attracted considerable attention and the results of these studies were published in the prestigious journal *Advanced Functional Materials*. We published our research results in three scientific papers in journals with IF from 3.4 to 9.8. The results were also presented at international conferences and as invited lectures at conferences and universities.

Completed basic project has also an applied value. We have developed a synthetic procedure for the preparation of zeolite NaX and transferred it to a semi-industrial level in the factory Silkem in Kidričevo. Upgrade from 250 ml to 1300-liter reactor was successful and the granular zeolite NaX is well crystalline. There are chances of implementation in the sorption-storage systems based on this granular zeolite. Experts from Slovenia and Austria are working on the technology.

Since 2013, Dr. Alenka Ristić is chairing the working group on engineering materials within the IEA (International Energy Agency) SHC ECES joint Task / Annex 42/29 "Compact Thermal Energy Storage: Material Development for System Integration".

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

SLO

Rezultati raziskav na področju materialov za shranjevanje toplote so za Slovenijo izredno pomembni. V razvitih državah dandanes namreč že preko 50% energije porabimo za ogrevanje in hlajenje stavb v gospodinjstvih in v industriji. Če bi kot vir energije za ogrevanje lahko v še večji meri uporabili sončno energijo, bi to prineslo daleč največje prihranke pri proizvodnji energije in daleč največje zmanjšanje pri izpustih  $\text{CO}_2$ . Študij materialov za shranjevanje toplote je namenjen prav temu vprašanju, namreč, kako uskladiščiti sončno energijo, ki jo imamo na voljo preko toplega dela leta, da bi jo v hladnem delu leta lahko uporabili za ogrevanje. S svojim delom v okviru projekta in v sodelovanju z drugimi evropskimi raziskovalnimi skupinami (ZAE Bayern, Fraunhofer ISE Freiburg) smo prispevali k rešitvi tega vprašanja.

Zaključeni temeljni projekt ima namreč tudi veliko uporabno vrednost. Razvili smo sintezni postopek za pripravo zeolita NaX in ga prenesli na pol-industrijski nivo v tovarni Silkem v Kidričevem. Prenos iz 250 ml na 1300-litrski reaktor je bil uspešen. V tovarni so pripravili dobro kristaliničen granuliran zeolit NaX. Kažejo se možnosti implementacije, saj so se z nami povezali strokovnjaki iz Slovenije in Avstrije, ki sestavljajo sorpcijsko-shranjevalne sisteme na osnovi granuliranega zeolita.

V zadnjih letih je Dr. Alenka Ristić zelo aktivna v International Energy Agency - IEA združenju, natančneje v IEA SHC ECES joint Task/Annex 42/24 (2009-2012) in 42/29 (2013-2015) »Compact thermal energy storage material development for system integration«. Oktobra 2013 je tako organizirala 10. mednarodno strokovno srečanje v okviru IEA joint SHC ECES Task/Annex 42/29 "Compact Thermal Energy Storage: Material Development for System Integration" na Kemijskem inštitutu. Srečanja se je udeležilo 35 strokovnjakov iz celega sveta. Za promocijo Slovenije in slovenske znanosti je njeno aktivno delovanje v IEA združenju v

zadnjih letih izjemno pomembno.

Dr. Tadeja Birsa Čelič je v okviru svoje doktorske naloge Razvoj poroznih kovinsko-organskih adsorbentov za shranjevanje plinov in toplote preučevala kovinsko-organske porozne materiale, to je kristalinične materiale zgrajene iz kovinskih oksidnih enot, ki so med sabo povezane z organskimi ligandi. Za te materiale so značilne izredno velike specifične površine in nizke gostote, zaradi česar so zelo zanimivi za shranjevanje vodika, shranjevanje in ločevanje ogljikovega dioksida in metana ter za shranjevanje energije.

Nataša Zabukovec Logar je v vabljenem predavanju na 1. Euro-Azijski Zeolitni konferenci (Macao, Januar 2013) predstavila osnovne koncepte shranjevanja toplote, s poudarkom na sorpcijskem shranjevanju toplote v aluminofosfatnih in kovinskoorganskih poroznih materialih. Pripravljeni so bili obetajoči kompozitni vodni sorbenti za shranjevanje sončne energije. Z mokro impregnacijo z raztopino kalcijevega klorida sta bila pripravljena dva različna sorpcijska kompozita za vodo, eden z neurejeno mesostruktarno matrico iz železovega silikata, drugi pa z urejeno mezoporozno silikatno matrico. Njune strukturne in vodne sorpcijske lastnosti so bile predstavljene na mednarodnem simpoziju 5th International Symposium Advanced Micro- and Mesoporous Materials v Varni 2013.

Novi hranilniki bodo omogočili trajno shranjevanje toplote - v članku v poslovnem časopisu z najvišjo odmevnostjo v Sloveniji je bilo na poljuden način predstavljeno področje shranjevanja energije, najnovejše tehnologije in lastne raziskave na tem področju, ki so v svetovnem vrhu (Gospodarski vestnik; Finance; 2012: Zabukovec Logar Nataša).

Vse zgoraj omenjene objave rezultatov naših raziskav so za Slovenijo zelo pomembne, saj nas uvrščajo med države, v katerih so raziskave na področju materialov za shranjevanje toplotne energije na najvišjem svetovnem nivoju.

ANG

For Slovenia the results of materials research to store heat are extremely important. In developed countries today already over 50% of the energy is consumed for heating and cooling buildings in households and in industry. If the source of energy for heating at an even greater extent could be the sun, that would bring larger savings in energy production, and by far the largest reduction in CO2 emissions. Study of materials for heat storage is helping this issue, namely how stored solar energy that we have available through the warm part of the year can be used for heating in the cold part of the year. With our work on the project and in cooperation with other European research groups (UAE Bayern, Fraunhofer ISE Freiburg), we help to resolve this issue.

Completed basic project has also an applied value. We have developed a synthetic procedure for the preparation of zeolite NaX and transferred it to a semi-industrial level in the factory Silkem in Kidričevo. Upgrade from 250 ml to 1300-liter reactor was successful and the granular zeolite NaX is well crystalline. There are chances of implementation in the sorption-storage systems based on this granular zeolite. Experts from Slovenia and Austria are working on the technology.

In recent years, Dr. Alenka Ristić is very active in the International Energy Agency - IEA association, specifically in the IEA SHC ECES joint Task / Annex 42/24 (2009-2012) and 42/29 (2013-2015) »Compact Thermal Energy Storage Material Development for System Integration". In October 2013 she also organized the 10th International expert meeting in the framework of the IEA SHC ECES joint Task / Annex 42/29 "Compact Thermal Energy Storage: Material Development for System Integration" at the National Institute of Chemistry in Ljubljana. The meeting was attended by 35 experts from around the world. For the promotion of Slovenia and the Slovenian science her active participation in the IEA association in recent years is extremely important.

Dr. Tadeja Birsa Čelič in the context of her doctoral thesis Development of porous metal-organic adsorbents for the storage of gases and of heat studied metal-organic porous materials. These are crystalline materials made of metal oxide units, which are linked with organic ligands. These materials are characterized by an extremely large specific surface area and low density, which makes them very interesting for hydrogen storage, the storage and separation of carbon dioxide and methane, as well as for energy storage.

Nataša Zabukovec Logar in an invited lecture at the First Euro-Asian Zeolite Conference (Macao, January 2013) introduced the basic concepts of heat storage, with emphasis on the sorption heat storage in the aluminophosphate and metal-organic porous materials.

We prepared promising aqueous composite sorbents for storing solar energy. With the wet impregnation with a solution of calcium chloride two different composites for sorption of water were prepared, one with random mesostructural matrix of iron silicate, and the other with an

ordered mesoporous silicate matrix. Their structural and water sorption properties were presented at the 5th International Symposium of Advanced Micro-and Mesoporous Materials in Varna 2013.

The new storage tanks will allow permanent storage of heat - in an article by Nataša Zabukovec Logar in the business newspaper from Slovenia. In a popular way the field of energy storage, the latest technologies and our own research in this area have been presented.

All the above-mentioned publications of the results of our research are very important for Slovenia, because they show that we are among the countries where the research of the materials for heat energy storage is at the highest world level.

**10. Samo za aplikativne projekte in podoktorske projekte iz gospodarstva!  
Označite, katerega od navedenih ciljev ste si zastavili pri projektu, katere konkretne rezultate ste dosegli in v kakšni meri so doseženi rezultati uporabljeni**

Cilj		
<b>F.01</b>	<b>Pridobitev novih praktičnih znanj, informacij in veščin</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.02</b>	<b>Pridobitev novih znanstvenih spoznanj</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.03</b>	<b>Večja usposobljenost raziskovalno-razvojnega osebja</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.04</b>	<b>Dvig tehnološke ravni</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.05</b>	<b>Sposobnost za začetek novega tehnološkega razvoja</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.06</b>	<b>Razvoj novega izdelka</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.07</b>	<b>Izboljšanje obstoječega izdelka</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE

	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.08</b>	<b>Razvoj in izdelava prototipa</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.09</b>	<b>Razvoj novega tehnološkega procesa oz. tehnologije</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.10</b>	<b>Izboljšanje obstoječega tehnološkega procesa oz. tehnologije</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.11</b>	<b>Razvoj nove storitve</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.12</b>	<b>Izboljšanje obstoječe storitve</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.13</b>	<b>Razvoj novih proizvodnih metod in instrumentov oz. proizvodnih procesov</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.14</b>	<b>Izboljšanje obstoječih proizvodnih metod in instrumentov oz. proizvodnih procesov</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.15</b>	<b>Razvoj novega informacijskega sistema/podatkovnih baz</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>



<b>F.16</b>	<b>Izboljšanje obstoječega informacijskega sistema/podatkovnih baz</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.17</b>	<b>Prenos obstoječih tehnologij, znanj, metod in postopkov v prakso</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.18</b>	<b>Posredovanje novih znanj neposrednim uporabnikom (seminarji, forumi, konference)</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.19</b>	<b>Znanje, ki vodi k ustanovitvi novega podjetja ("spin off")</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.20</b>	<b>Ustanovitev novega podjetja ("spin off")</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.21</b>	<b>Razvoj novih zdravstvenih/diagnostičnih metod/postopkov</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.22</b>	<b>Izboljšanje obstoječih zdravstvenih/diagnostičnih metod/postopkov</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.23</b>	<b>Razvoj novih sistemskih, normativnih, programskih in metodoloških rešitev</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.24</b>	<b>Izboljšanje obstoječih sistemskih, normativnih, programskih in metodoloških rešitev</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE

	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.25</b>	<b>Razvoj novih organizacijskih in upravljavskih rešitev</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.26</b>	<b>Izboljšanje obstoječih organizacijskih in upravljavskih rešitev</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.27</b>	<b>Prispevek k ohranjanju/varovanju naravne in kulturne dediščine</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.28</b>	<b>Priprava/organizacija razstave</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.29</b>	<b>Prispevek k razvoju nacionalne kulturne identitete</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.30</b>	<b>Strokovna ocena stanja</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.31</b>	<b>Razvoj standardov</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.32</b>	<b>Mednarodni patent</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.33</b>	<b>Patent v Sloveniji</b>	

	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.34</b>	<b>Svetovalna dejavnost</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.35</b>	<b>Drugo</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>

**Komentar**

--

**11. Samo za aplikativne projekte in podoktorske projekte iz gospodarstva!**  
**Označite potencialne vplive oziroma učinke vaših rezultatov na navedena področja**

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

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

**Komentar**

--

**12.Pomen raziskovanja za sofinancerje<sup>11</sup>**

	Sofinancer		
1.	Naziv		
	Naslov		
	Vrednost sofinanciranja za celotno obdobje trajanja projekta je znašala:		EUR
	Odstotek od utemeljenih stroškov projekta:		%
	Najpomembnejši rezultati raziskovanja za sofinancerja	Šifra	
	1.		
	2.		
3.			
4.			
5.			

	Komentar	
	Ocena	

### 13. Izjemni dosežek v letu 2013<sup>12</sup>

#### 13.1. Izjemni znanstveni dosežek

1.01. Izvirni znanstveni članek

Vir: BIRSA ČELIČ, Tadeja, MAZAJ, Matjaž, MALI, Gregor, RANGUS, Mojca, ČENDAK, Tomaž, KAUČIČ, Venčeslav, ZABUKOVEC LOGAR, Nataša, et al. Study of hydrothermal stability and water sorption characteristics of 3-dimensional Zn-based trimesate. The journal of physical chemistry. C, Nanomaterials and interfaces, 2013, vol. 117, iss. 28, str. 14608-14617. [COBISS.SI-ID 5277722]

Hidrotermična stabilnost  $Zn_2(BTC)(OH)(H_2O) \cdot 1,67H_2O$  adsorbenta je njegova edinstvena lastnost, saj je večina cinkovih karboksilatov nestabilnih že v prisotnosti majhnih količin vode. Dokazali smo, da k temu največ prispevajo vodikove vezi med prostimi molekulami vode in koordinirano vodo na anorganskih verigah ter n- $\pi$  interakcije med aromatskimi obroči. Proces adsorpcije in desorpcije vode smo poleg merjenja vodnih izoterm spremljali tudi z in situ NMR in IR spektroskopijo.

#### 13.2. Izjemni družbeno-ekonomski dosežek

10. mednarodno strokovno srečanje v okviru IEA joint SHC ECES Task/Annex 42/29 "Compact Thermal Energy Storage: Material Development for System Integration" (2013-2015) od 2.-4. oktobra 2013 na Kemijskem inštitutu v Ljubljani.

Dr. Alenka Ristić je leta 2013 postala vodja delovne skupine A1 Materials engineering and processing v IEA joint SHC ECES Task/Annex 42/29 "Compact Thermal Energy Storage: Material Development for System Integration" (2013-2015) in je tudi organizirala 10. mednarodno strokovno srečanje v okviru tega taska. Srečanja se je udeležilo 35 udeležencev iz celega sveta.

## C. IZJAVE

Podpisani izjavljam/o, da:

- so vsi podatki, ki jih navajamo v poročilu, resnični in točni
- se strinjamo z obdelavo podatkov v skladu z zakonodajo o varstvu osebnih podatkov za potrebe ocenjevanja ter obdelavo teh podatkov za evidence ARRS
- so vsi podatki v obrazcu v elektronski obliki identični podatkom v obrazcu v pisni obliki
- so z vsebino zaključnega poročila seznanjeni in se strinjajo vsi soizvajalci projekta

#### Podpisi:

*zastopnik oz. pooblaščen oseba  
raziskovalne organizacije:*

in

*vodja raziskovalnega projekta:*

Kemijski inštitut

Venčeslav Kaučič

**ŽIG**

Kraj in datum:

Ljubljana

30.3.2014

## Oznaka prijave: ARRS-RPROJ-ZP-2014/23

---

- <sup>1</sup> Napišite povzetek raziskovalnega projekta (največ 3.000 znakov v slovenskem in angleškem jeziku) [Nazaj](#)
- <sup>2</sup> Napišite kratko vsebinsko poročilo, kjer boste predstavili raziskovalno hipotezo in opis raziskovanja. Navedite ključne ugotovitve, znanstvena spoznanja, rezultate in učinke raziskovalnega projekta in njihovo uporabo ter sodelovanje s tujimi partnerji. Največ 12.000 znakov vključno s presledki (približno dve strani, velikost pisave 11). [Nazaj](#)
- <sup>3</sup> Realizacija raziskovalne hipoteze. Največ 3.000 znakov vključno s presledki (približno pol strani, velikost pisave 11) [Nazaj](#)
- <sup>4</sup> V primeru bistvenih odstopanj in sprememb od predvidenega programa raziskovalnega projekta, kot je bil zapisan v predlogu raziskovalnega projekta oziroma v primeru sprememb, povečanja ali zmanjšanja sestave projektne skupine v zadnjem letu izvajanja projekta, napišite obrazložitev. V primeru, da sprememb ni bilo, to navedite. Največ 6.000 znakov vključno s presledki (približno ena stran, velikost pisave 11). [Nazaj](#)
- <sup>5</sup> Navedite znanstvene dosežke, ki so nastali v okviru tega projekta. Raziskovalni dosežek iz obdobja izvajanja projekta (do oddaje zaključnega poročila) vpišete tako, da izpolnite COBISS kodo dosežka – sistem nato sam izpolni naslov objave, naziv, IF in srednjo vrednost revije, naziv FOS področja ter podatek, ali je dosežek uvrščen v A'' ali A'. [Nazaj](#)
- <sup>6</sup> Navedite družbeno-ekonomske dosežke, ki so nastali v okviru tega projekta. Družbeno-ekonomski rezultat iz obdobja izvajanja projekta (do oddaje zaključnega poročila) vpišete tako, da izpolnite COBISS kodo dosežka – sistem nato sam izpolni naslov objave, naziv, IF in srednjo vrednost revije, naziv FOS področja ter podatek, ali je dosežek uvrščen v A'' ali A'.
- Družbeno-ekonomski dosežek je po svoji strukturi drugačen kot znanstveni dosežek. Povzetek znanstvenega dosežka je praviloma povzetek bibliografske enote (članka, knjige), v kateri je dosežek objavljen.
- Povzetek družbeno-ekonomskega dosežka praviloma ni povzetek bibliografske enote, ki ta dosežek dokumentira, ker je dosežek sklop več rezultatov raziskovanja, ki je lahko dokumentiran v različnih bibliografskih enotah. COBISS ID zato ni enoznačen, izjemoma pa ga lahko tudi ni (npr. prehod mlajših sodelavcev v gospodarstvo na pomembnih raziskovalnih nalogah, ali ustanovitev podjetja kot rezultat projekta ... - v obeh primerih ni COBISS ID). [Nazaj](#)
- <sup>7</sup> Navedite rezultate raziskovalnega projekta iz obdobja izvajanja projekta (do oddaje zaključnega poročila) v primeru, da katerega od rezultatov ni mogoče navesti v točkah 6 in 7 (npr. ni voden v sistemu COBISS). Največ 2.000 znakov, vključno s presledki. [Nazaj](#)
- <sup>8</sup> Pomen raziskovalnih rezultatov za razvoj znanosti in za razvoj Slovenije bo objavljen na spletni strani: <http://sicris.izum.si/> za posamezen projekt, ki je predmet poročanja [Nazaj](#)
- <sup>9</sup> Največ 4.000 znakov, vključno s presledki [Nazaj](#)
- <sup>10</sup> Največ 4.000 znakov, vključno s presledki [Nazaj](#)
- <sup>11</sup> Rubrike izpolnite / prepisite skladno z obrazcem "izjava sofinancerja" <http://www.arrs.gov.si/sl/progproj/rproj/gradivo/>, ki ga mora izpolniti sofinancer. Podpisan obrazec "Izjava sofinancerja" pridobi in hrani nosilna raziskovalna organizacija – izvajalka projekta. [Nazaj](#)
- <sup>12</sup> Navedite en izjemni znanstveni dosežek in/ali en izjemni družbeno-ekonomski dosežek raziskovalnega projekta v letu 2013 (največ 1000 znakov, vključno s presledki). Za dosežek pripravite diapozitiv, ki vsebuje sliko ali drugo slikovno gradivo v zvezi z izjemnim dosežkom (velikost pisave najmanj 16, približno pol strani) in opis izjemnega dosežka (velikost pisave 12, približno pol strani). Diapozitiv/-a priložite kot priponko/-i k temu poročilu. Vzorec diapozitiva je objavljen na spletni strani ARRS <http://www.arrs.gov.si/sl/gradivo/>, predstavitev dosežkov za pretekla leta pa so objavljena na spletni strani <http://www.arrs.gov.si/sl/analize/dosez/>. [Nazaj](#)

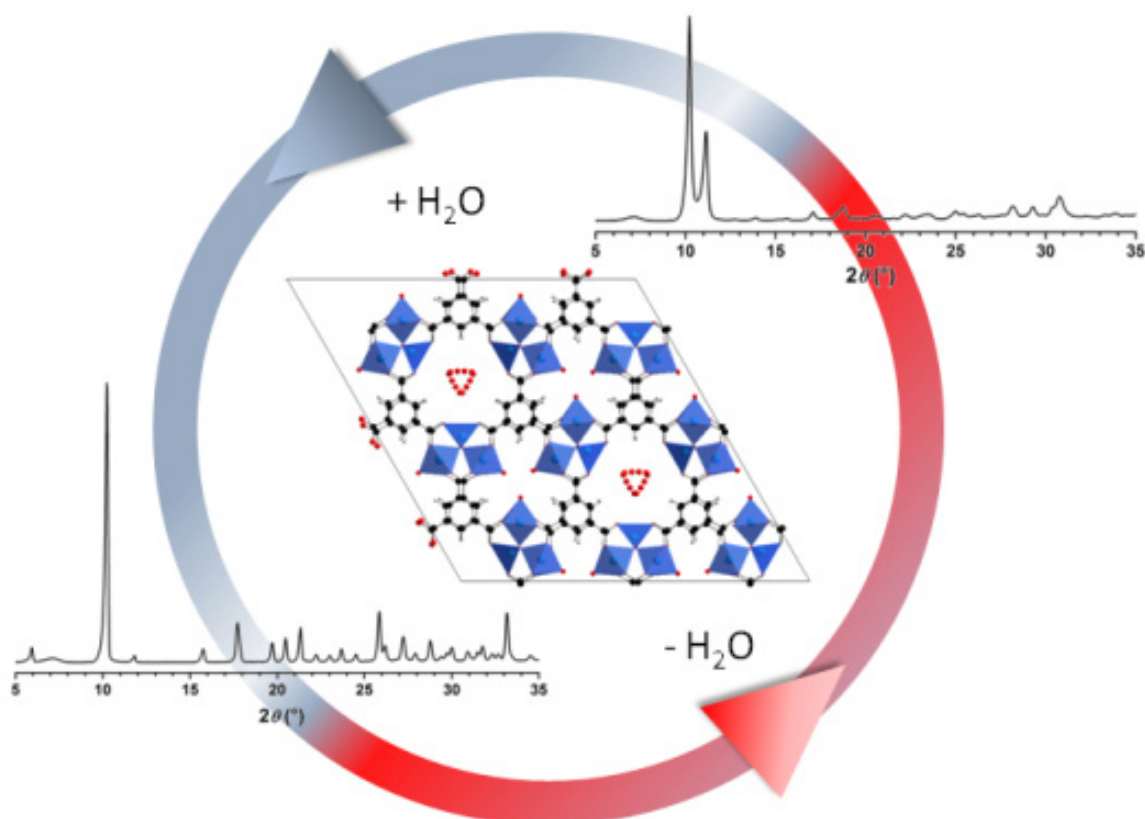
Obrazec: ARRS-RPROJ-ZP/2014 v1.01  
8F-22-15-AF-4B-6F-87-29-F4-DC-EC-1C-90-43-41-C1-C9-F7-C1-42

## **Priloga 1**

# KEMIJA

## Področje: 1.04.03 Anorganska kemija

Dosežek 1: 1.01, Vir: BIRSA ČELIČ, Tadeja, MAZAJ, Matjaž, MALI, Gregor, RANGUS, Mojca, ČENDAK, Tomaž, KAUČIČ, Venčeslav, ZABUKOVEC LOGAR, Nataša, et al. Study of hydrothermal stability and water sorption characteristics of 3-dimensional Zn-based trimesate. The journal of physical chemistry. C, Nanomaterials and interfaces, 2013, vol. 117, iss. 28, str. 14608-14617. [COBISS.SI-ID 5277722]



Hidrotermična stabilnost  $\text{Zn}_2(\text{BTC})(\text{OH})(\text{H}_2\text{O}) \cdot 1,67\text{H}_2\text{O}$  adsorbenta je njegova edinstvena lastnost, saj je večina cinkovih karboksilatov nestabilnih že v prisotnosti majhnih količin vode. Dokazali smo, da k temu največ prispevajo vodikove vezi med prostimi molekulami vode in koordinirano vodo na anorganskih verigah ter  $\pi$ - $\pi$  interakcije med aromatskimi obroči. Proces adsorpcije in desorpcije vode smo poleg merjenja vodnih izoterm spremljali tudi z in situ NMR in IR spektroskopijo.



KEMIJA

Področje: 1.04.03 Anorganska kemija

Dosežek 2: 10. mednarodno strokovno srečanje v okviru IEA joint SHC ECES Task/Annex 42/29 "Compact Thermal Energy Storage: Material Development for System Integration" (2013-2015) od 2.-4. oktobra 2013 na Kemijskem inštitutu v Ljubljani.



**IEA Task 42 29  
Expert Meeting**



2<sup>nd</sup> – 4<sup>th</sup> October 2013

National Institute of  
Chemistry  
Ljubljana, Slovenia

Dr. Alenka Ristić je leta 2013 postala vodja delovne skupine A1 Materials engineering and processing v IEA joint SHC ECES Task/Annex 42/29 "Compact Thermal Energy Storage: Material Development for System Integration" (2013-2015) in je tudi organizirala 10. mednarodno strokovno srečanje v okviru tega taska. Srečanja se je udeležilo 35 udeležencev iz celega sveta.