

1. Cele projektu badawczego

Celem naukowym jest uzyskanie szerokiej wiedzy na temat reakcji redukcji wywoływanych przez nowe typy redukcyjnych indywiduów rodnikowych (ang. *Reductive Radical Species*, RRS) oraz hydratowanych elektronów z związkami organicznymi w fazie wodnej. Badania te powinny dostarczyć licznych odkryć naukowych o dużym znaczeniu dla rozwoju zaawansowanych procesów chemicznego oczyszczania do degradacji zanieczyszczeń organicznych w wodzie i ściekach.

Wysocze reaktywne indywidua chemiczne powodujące reakcje redukcji są w stanie zapewnić wysoką skuteczność degradacji związków organicznych, które są odporne na utlenianie, a opracowane procesy będą alternatywą dla szeroko badanych Zaawansowanych Procesów Utleniania (ang. *Advanced Oxidation Processes*, AOPs).

RRSs będą generowane z różnych prekursorów (substancji chemicznych). Wybrane prekursory oraz powstałe z nich RRS-y nie były dotychczas badane w Zaawansowanych Procesach Redukcji (ang. *Advanced Reduction Processes*, ARP). Możliwość ich tworzenia w wyniku aktywacji wybranych substancji chemicznych będzie badana w warunkach fotolizy, katalizy, fotokatalizy oraz kawitacji.

Powstałe RRSs będą wykorzystywane bezpośrednio do degradacji zanieczyszczeń organicznych, jak również do tworzenia wtórnych RRSs w reakcjach z innymi substancjami chemicznymi, co zwiększy ogólną skuteczność procesu oraz zapewni inny mechanizm degradacji i selektywność.

2. Metodologia projektu badawczego

Planowane badania zostaną przeprowadzone dla kilku grup związków – nowo pojawiających się zanieczyszczeń obecnych w wodzie oraz ściekach przemysłowych. Docelowe zanieczyszczenia będą częściowo lub całkowicie halogenowane, niektóre będą zawierać grupy nitrowe i/lub wiązania nienasycone. Badane związki chemiczne zawierające takie atomy lub grupy funkcyjne będą należeć do PFAS, farmaceutyków, pestycydów i będą obejmować różne typy związków organicznych. W projekcie zostanie zastosowanych kilka układów reakcyjnych opartych na procesach wspomaganych światłem UV i widzialnym, kawitacji hydrodynamicznej (HC) oraz sonokawitacji (SC).

Degradacja wybranych zanieczyszczeń będzie monitorowana przy użyciu nowoczesnych technik analitycznych, w tym technik chromatograficznych (GC, UHPLC, IC z różnymi detektorami, w tym MS); pomiarów ChZT, OWO i BZT; oceny biotoksyczności; analizy RRS przy użyciu EPR i testów selektywnego tłumienia rodników. Inne techniki (obliczenia DFT, QC/MC oraz AIMD, ICP-OES, analiza elementarna) zostaną użyte do dogłębnej oceny istotnych aspektów procesu (mechanizmu, wymywania metali z katalizatorów, zmian w ogólnym składzie ścieków itd.). Badane układy zostaną porównane pod względem skuteczności degradacji, wydajności rodnikowej, selektywności, mechanizmów degradacji, kinetyki, wpływu matrycy (obecności kationów, anionów i naturalnej materii organicznej), rodzaju powstających produktów ubocznych i ich toksyczności. Dla każdego opracowanego procesu zostaną określone optymalne warunki wraz z oceną efektywności energetycznej i chemicznej.

3. Oczekiwany wpływ projektu badawczego na rozwój nauki

Prekursory RRSs, które będą użyte w tym projekcie, są pochodzenia naturalnego i ulegają biodegradacji, co czyni opracowane rozwiązania zieloną alternatywą dla obecnie stosowanych technologii. Projekt zakłada również zastosowanie nowych typów katalizatorów i fotokatalizatorów, które mogą znacznie poprawić efektywność procesu. Układy hybrydowe, obejmujące zaproponowane metody intensyfikacji procesów, mogą pozwolić na opracowanie całkowicie nowej strategii redukcyjnych procesów degradacji w zastosowaniach oczyszczania wody i ścieków.

Badania prowadzone w ramach niniejszego projektu powinny zaowocować publikacjami w najlepszych czasopiśmiech z dyscypliny. Oczekuje się, że opublikowane wyniki będą miały istotny wpływ na rozwój dyscypliny, dostarczając solidnych podstaw do przyszłych badań. Projekt ujawni kluczowe mechanizmy związane z aktywacją nowych reduktorów, wprowadzi nowe typy RRSs oraz umożliwi optymalizację parametrów procesu w celu maksymalizacji jego wydajności. Umożliwi również identyfikację klas związków, które skutecznie ulegają transformacji w badanych warunkach. Wiedza ta otworzy drogę do dalszych badań, w szczególności, w zakresie opracowywania rozwiązań w dziedzinie oczyszczaniu wody i ścieków. Przyszłe kierunki badań mogą obejmować projektowanie dedykowanych katalizatorów (z typów badanych w tym projekcie) w celu intensyfikacji ARP, badania nad nowymi systemami reduktorów zewnętrznych oraz badania aplikacyjne ukierunkowane na konkretne grupy zanieczyszczeń, zwłaszcza w kontekście ścieków przemysłowych i szeroko pojętych nauk środowiskowych.