



## ZAKLJUČNO POROČILO RAZISKOVALNEGA PROJEKTA

### A. PODATKI O RAZISKOVALNEM PROJEKTU

#### 1.Osnovni podatki o raziskovalnem projektu

<b>Šifra projekta</b>	J2-4287
<b>Naslov projekta</b>	Tankoplastne organsko-anorganske strukture za elektronske komponente
<b>Vodja projekta</b>	15703 Janez Kovač
<b>Tip projekta</b>	J Temeljni projekt
<b>Obseg raziskovalnih ur</b>	8430
<b>Cenovni razred</b>	B
<b>Trajanje projekta</b>	07.2011 - 06.2014
<b>Nosilna raziskovalna organizacija</b>	106 Institut "Jožef Stefan"
<b>Raziskovalne organizacije - soizvajalke</b>	1554 Univerza v Ljubljani, Fakulteta za matematiko in fiziko
<b>Raziskovalno področje po šifrantu ARRS</b>	2 TEHNIKA 2.09 Elektronske komponente in tehnologije 2.09.05 Vakuumistika
<b>Družbeno-ekonomski cilj</b>	13.02 Tehnološke vede - RiR financiran iz drugih virov (ne iz SUF)
<b>Raziskovalno področje po šifrantu FOS</b>	2 Tehniške in tehnološke vede 2.02 Elektrotehnika, elektronika in informacijski inženiring

### B. REZULTATI IN DOSEŽKI RAZISKOVALNEGA PROJEKTA

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

SLO

V elektronskih elementih, temelječih na organskih spojinah, lahko s kombinacijo organsko/anorganskih materialov združimo prednosti in zmanjšamo njihove omejitve, pestrost izbire organskih molekul pa obenem omogoča kontrolirano spremenjanje elektronskih in kemijskih lastnosti takšnih naprav. V okviru izvedenega projekta smo

študirali začetne faze formiranja organsko-anorganske fazne meje, vrste kemijskih vezi na meji, dinamiko nosilcev naboja ob fazni meji, elektronsko in geometrijsko strukturo ter morfologijo plasti organskih molekul in ter njihovo termično stabilnost.

V sistemu prototipske molekule 1,4 benzenediamina (BDA) na podlagi Au smo pri preiskavah transporta naboja pokazali, da je mogoče nasprotno od uveljavljjenega mnenja doseči hiter prenos naboja tudi v sistemih, kjer ni prisotna močna kovalentna vez med organsko molekulo in podlago, ter tako potrdili meritve molekulskih prevodnosti tudi s spektroskopskimi meritvami ultrahitre delokalizacije vzbujenih elektronov v hibridnih stikih. V večplastni organski strukturi heksabenzokoronenov in fulerenov (HBC/C<sub>60</sub>) smo pojasnili vpliv medsebojnega ujemanja oblike organskih molekul na učinkovitost transporta naboja. Pokazali smo, da kontrolirano medsebojno prileganje heterogenih molekul donorskoga in akceptorskoga tipa prispeva k višji učinkovitosti v fotovoltaičnih elementih. V molekulskih plasteh paraciklofanov z dvema vzporednima fenilnima obročema na podlagah iz Au smo določili vpliv prostorskega prekrivanja sosednjih molekulskih orbital in izmerili, kako prostorska sklopitev  $\pi$ -konjugiranih elektronov med razmaknjениmi fenilnimi obroči določa hitrost prenosa naboja in s tem stopnjo transportne dinamike elektronov preko praznih orbital med aromatskimi obroči. Optimizirali smo pripravo organskih plasti različnih aminosilanskih molekul alifatskega in aromatskega tipa na Si podlago iz raztopine, ki so bile uporabljeni v senzorjih za selektivno detekcijo plinskih molekul v področju nizkih koncentracij. Ugotovili smo, kako na kvaliteto in morfologijo pripravljenih plasti vplivajo vrsta uporabljenega aminosilana, število vezavnih mest molekule, čas in temperatura nanašanja, vrsta topila in koncentracija molekul. Raziskali smo še nastanek novih faz na faznih mejah v večplastnih strukturah C/Si/C/Si/C, ki smo jih obstreljevali z ionskimi curki, termično stabilnost kovinskih ftalocianinov CuPC na podlagah iz Au, Ag in Cu in začetno fazo rasti plasti Pb na podlagi Ge(001).

Eksperimentalno delo je bilo izvedeno v laboratorijih v Ljubljani in na sinhrotronskem pospeševalniku Elettra v Trstu. V okviru projekta sta sodelovala dva mlada raziskovalca, ki sta iz te tematike pripravila svoji doktorski disertaciji.

**Rezultate raziskav smo predstavili v pomembnih znanstvenih revijah z zelo visokim faktorjem vpliva in z vabilnimi predavanji.**

ANG

Electronic devices based on organic materials attract much attention in several applications (e.g. illumination devices, color digital displays, photovoltaic elements, sensors, lasers...) due to their lower production and processing costs comparing to conventional semiconductors. The advantage of hybrid organic-inorganic elements is to keep and enhance the best properties of both materials and reduce their particular limitations. In the frame of the project we studied the initial phase of formation of the thin organic film/inorganic substrate interface, what are the chemical bonds at the interface, what is dynamics of the charge transfer across the organic/substrate interface, what is the relation between the chemical bonds and the growth mode of the organic film, what is the electronic and geometric structure of the thin organic film and what is the chemical and temperature stability of the organic films.

In the system of the model aromatic layer 1,4- benzenediammine (BDA) on Au substrate we studied transport of charge carriers over hybide interface as a function of a specific type of chemical bonding of BDA molecules to the Au substrate. Our results show that weak amine-Au donor-acceptor bond allows for ultrafast carrier transfer between molecule and Au substrate and evidence that efficient charge transport does not require a covalently bonded system. In the heterogeneous organic multilayer of hexabenzocorone (HBC) and C<sub>60</sub> layers we studied electronic coupling, level alignment and charge transfer rates at interface. We showed that shape complementary heterojunction based on the donor-acceptor shape matching lead to improved efficiency of organic photovoltaic devices. We studied the role of weak intermolecular interactions on charge transfer rate in pi-stacked layers of cyclophanes and found that femtosecond charge transfer dynamics between aromatic rings strongly depend on the inter-ring distance. We optimized the preparation of aromatic and aliphatic aminosilane on the Si

substrates from a solution using them in sensor applications for specific gas detection at very low concentration. We found how the quality and morphology of deposited aminosilane films depend on type of aminosilane, number of bonding sites, time and temperature of deposition, type of solvent and concentration on silane molecules.

We studied also the formation of new phases in multilayer system C/Si/C/Si/C which was induced by irradiation with ion beam, the thermal stability of metallic phtalocianes CuPC on the Au, Ag and Cu substrates and the early stages of Pb/Ge(001).

In the frame of the project two young researchers were involved and they prepared their doctoral thesis from the research activity. Results of the project were published in very high level scientific journal with very high impact indexes and were presented by invited lectures at scientific conferences.

Experimental work was performed at laboratories in Ljubljana and also at synchrotron light source Elettra in Trieste.

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

Raziskave v okviru izvedenega projekta so osvetile osnovne procese med formiranjem in rastjo tankih organskih plasti na anorganskih podlagah. Prišli smo do novih spoznanj o vlogi medmolekulske interakcije in interakcije z anorgansko podlogo. Ta spoznanja bodo prispevala k boljšemu razumevanju formiranja organsko-anorganskih faznih mej. Osvetli smo vlogo omejene geometrije in kvantizacije elektronskih stanj na formiranje prevodnih heterogenih plasti, ki imajo možne implikacije v tehnologiji organskih polprevodnikov. V okviru izvedenega projekta smo zato študirali začetne faze formiranja organsko-anorganske fazne meje, vrste kemijskih vezi na meji, dinamiko nosilcev naboja ob fazni meji, elektronsko in geometrijsko strukturo ter morfologijo plasti organskih molekul in ter njihovo termično stabilnost.

Delo na projektu smo v večji meri izvajali v okviru Laboratorija za analizo površin in tankih plasti na Odseku za tehnologijo površin in optoelektroniko na Institutu Jožef Stefan in v okviru Fakultete za matematiko in fiziko Univerze v Ljubljani. Intenzivno smo izvajali eksperimentalno delo tudi na sinhrotronskem pospeševalniku Elettra v Trstu na žarkovni liniji ALOISA. Poleg tega smo del aktivnosti opravili v okviru EU projekta PlasmaNice (NMP-IP 211473) in v okviru bilateralnega projekta z Univerzo Shantou v Republiki Kitajski (B1-CN/11-13-006).

V okviru raziskav transporta naboja v organskih stikih smo proučevali vpliv jakosti molekulskih interakcij na hitrost prenosa naboja ob hibridnem molekulskega stiku. Izmerili smo ultrahiter transport vzbujenih elektronov na različnih mestih prototipske molekule 1,4-diaminobenzena (BDA), ki na fazni meji Au(111) tvori dve monoplastni fazi s komplementarno adsorpcijsko geometrijo molekul. Iz meritev resonančne rentgenske spektroskopije in povezanih teoretičnih izračunov v okviru teorije gostotnih funkcionalov smo določili delokalizacijsko dinamiko vzbujenih elektronov na različnih mestih plosko- in pokončno- ležečih molekul. Z visoko prostorsko in orbitalno resolucijo smo določili mesta v molekuli BDA, ki omogočajo ultrahiter prenos naboja prek praznih molekulskega orbital in ga povezali s specifično kemično vezavo molekul. Kvantitativno smo izmerili čase delokalizacije vzbujenih elektronov, ki jih omogočajo donorsko/akceptorska sklopitev N-Au, vodikova vez in šibka sklopitev pi orbital aromatskega obroča BDA s površino Au. Dobljeni rezultati kažejo, da za ultrahiter prenos naboja z organskih molekul ni nujno potrebna močna kovalentna vez s substratom. Rezultate smo objavili v publikaciji G. Kladnik et al., *The journal of physical chemistry. C, Nanomaterials and interfaces*, **117**, 16477, 2013.

Razumevanje prenosa naboja v hibridnih sistemih med tankimi organskimi plasti in anorgansko podlogo je osrednjega pomena za načrtovanje materialov za hibridne mikroelektronske naprave. Vendar je natančna kvantitativna analiza prenosa naboja zelo omejena zaradi nedoločene morfologije molekulski plasti. Z metodo resonančne fotoelektronske spektroskopije smo izmerili dinamiko prenosa naboja v področju fs v različnih molekulah ciklofanov, ki kažejo pi-sklopitev. Ugotovili smo, kako je prenos naboja povezan z jakostjo sklopitve v aromatskem obroču. Tako smo v molekulskih plasteh 2,2- in 4,4-paraciklofanov z dvema vzporednima fenilnima obročema na podlagah iz Au izmerili, da prostorska sklopitev pi-konjugiranih elektronov med razmaknjenimi fenilnimi obroči, določa hitrost prenosa naboja in da so časi prehoda od 2 do 50 fs. (članek v Nature Communications, 2012, 3, 1086-1, D. Cvetko).

Aminosilani tvorijo spontano urejene plasti in tako modificirane površine so uporabne za izdelavo selektivnih senzorjev za pline pri nizkih koncentracijah. V sklopu projekta smo za ta namen študirali in

optimizirali pripravo tankih organskih plasti raznih aminosilanov na podlagi iz Si. Tanke silanske plasti smo pripravili s postopkom nanašanja iz raztopine. Preučevali smo učinkovitost depozicije 8 različnih aminosilanskih modifikatorjev: ODS, APTMS, APTES, APDMS, APEMS, APhS, UPS in EDA. Nanose na predhodno obdelane silicijeve rezine smo izvedli pri različnih koncentracijah modifikatorja, v različnih topilih (voda, etanol, aceton, acetonitril, DMF, toluen), spremenjali smo temperaturo in čas nanosa in študirali vpliv prisotnosti vode na količino nanosa. Sestavo nanesenih plasti in kemične reakcije s podlago smo analizirali z metodama XPS in ToF-SIMS, morfologijo plasti pa z metodama AFM in SEM. Ugotovili smo, da so ponovljivi rezultati možni le pri strogo kontroliranih pogojih nanosa (ustrezno predhodno pripravljena površina, suha topila, inertna atmosfera, kraji časi nanosa, nižje temperature nanosa, nizke koncentracije organskih molekul...). Nanesene plasti smo testirali tudi v senzorjih za detekcijo plinov, kjer so se pokazali za zelo obetavne. Dobljene rezultate smo objavili v reviji *Applied Surface Science* vol. 315, no. 1, str. 516-522 v članku »Influence of different solvents on the morphology of APTMS-modified silicon surfaces« avtorjev G. Jakša, B. Štefane in J. Kovač in v reviji *Surface and Interface Analysis* 45 (2013) 1709-1713 v članku "XPS and AFM characterization of aminosilanes with different numbers of bonding sites on a silicon wafer" avtorjev G. Jakša, B. Štefane in J. Kovač.

Konformno prilagajanje molekul v donorsko akceptorskih (D/A) faznih mejah, predstavlja zametke nove smeri v razvoju organskih fotovoltaičnih elementov, ki po učinkovitosti za red velikosti prekašajo sorodne elemente s ploščatim donorjem. V sklopu meritev elektronske strukture hetero-organskih stikov smo proučevali heterosestave policikličnih aromatskih ogljikovodikov, ki izkoriščajo dobro prileganje oblike staknjenih D/A molekul na nanometrični skali (donor=raven/upognjen hexabenzocoronen; f-/c-HBC, acceptor=fuleren, C<sub>60</sub>). Meritve resonančne fotoelektronske spektroskopije podprte z numeričnimi izračuni v okviru teorije gostotnih funkcionalov kažejo, da omogoča oblikovno usklajen molekulski stik c-HBC/C<sub>60</sub> v primerjavi s ploskim f-HBC/C<sub>60</sub> bistveno hitrejši prenos naboja oziroma, bistveno hitrejšo disociacijo vzbujenega excitona ob heteroorganskem stiku. Naši izsledki nadalje kažejo, da se v razsežnem filmu boljša sklopitev D/A stika odraža tudi v izrazitejšem mešanju obeh komponent, kar vodi do večjega aktivnega področja organskega nanosa, oboje pa prispeva k višji učinkovitosti v fotovoltaičnih elementih. O tem je bil objavljen znanstveni članek v Schiros T., Kladnik G. in Cvetko D. et al., *Donor-acceptor shape matching drives performance in photovoltaics. Advanced energy materials*, 2013, vol. 3, iss. 7, str. 894-902.

V tankoplastni hibridni strukturi C/Si/C/Si/C/Si smo z ionskim curkom (FIB) na faznih mejah Si/C formirali novo fazo, to je SiC. Med obstrelevanjem z ionskim curkom je prišlo do asimetričnega mešanja atomov C in Si, pri čemer je zreagiral del atomov v amorfno fazo SiC. Ugotovili smo parametre kontrolirane rasti SiC plasti. Rezultate smo objavili v reviji *Applied Surface Science*; 2012; Vol. 263; str. 367-362 v članku »Growth of amorphous SiC film on Si by means of ion beam induced mixing« v avtorjev Barna A., Kovač Janez, Panjan Peter et al.

Študirali smo tudi interakcijo med tankimi organskih polprevodniških plastmi Cu-ftalocianinov - CuPC in polikristaliničnimi kovinskimi podlagami Au, Ag in Cu z namenom študija termične stabilnosti teh plasti, ki so prototip organske molekule za tanke organske polprevodnikške plasti v optičnih in elektronskih napravah. Plasti smo pripravili z metodo vakumske depozicije in preiskal smo njihovo termična stabilnost v odvisnosti od kovinske podlage v temperaturnem področju 25 - 400 °C. Segrevanje plasti vodi do molekularne desorpkcije pri 280-320 °C in končno do nastanka monoplasti reakcijskih produktov iz CuPC na kovinski površini. O tem je bil predstavljen prispevek na 12. evropski vakuumski konferenci EVC-12, 4.-8. junij 2012, Dubrovnik, Hrvaška z naslovom: "Thermal stability of copper phthalocyanine films deposited on polycrystalline Au, Ag and Cu", avtorji G. Bavdek, G. Jakša in J. Kovač.

Študirali smo tudi začetno fazo rasti plasti Pb atomov na podlagi iz Ge(001) z namenom, da bi razumeli dinamiko rasti v področju debelin nekaj monoplasti in kako se pri tem spremenjajo elektronske lastnosti. Ugotovili smo, da plasti debeline do 4 monoplasti kažejo zelo raznoliko morfologijo in drugačne elektronske lastnosti od tistih, ki so prisotne v plasteh debeline nad 4 monoplasti. Rezultate smo objavili v reviji *Surface Science* 630 (2014) 260-264 avtorjev G. Bavdek, D. Cvetko et al.

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

Ocenjujemo, da je bila realizacija izvedenega dela v skladu z zastavljenimi raziskovalnimi cilji. Pri izvedbi projekta smo prišli do novih spoznanj o hibridnih organsko-anorganskih večplastnih strukturah za elektronske komponente. Preiskali smo vlogo omejene geometrije in kvantizacije elektronskih stanj na formiranje prevodnih heterogenih plasti, ki imajo možne implikacije v tehnologiji organskih polprevodnikov. V okviru izvedenega projekta smo zato študirali začetne faze formiranja organsko-anorganske fazne meje, vrste kemijskih vezi na meji, dinamiko nosilcev naboja ob fazni meji, elektronsko in geometrijsko strukturo ter morfologijo plasti organskih molekul in ter njihovo termično stabilnost.

Preiskali smo transport naboja v hibridnih plasteh preko praznih molekulskih orbital aromatskih molekul iz družine na podlagah iz Au in potrdili hipotezo, da sklopitev  $\pi$ -konjugiranih elektronov med razmaknjeniimi fenilnimi obroči, bistveno določa hitrost prenosa naboja.

Potrdili smo tudi našo hipotezo o pozitivnem vplivu vmesne tanke organske plasti v organskih heterostrukturah na boljšo izvedbo organskih-elektronskih naprav. V primeru vmesne plasti iz cisteaminskih molekul na površini Au smo pokazali, da le-ta predstavlja učinkovito premostitveno orodje za selektivno vezavo nadaljnjih urejenih organskih nanosov.

V sistemu prototipske molekule BDA/Au smo potrdili hipotezo, da je mogoče doseči hiter prenos naboja med organskimi molekulami tudi v sistemih, kjer ni prisotna močna kovalentna vez med organsko molekulo in podlago.

Nadalje smo pojasnili tudi vpliv medsebojne lege molekul na v heterogenih organskih plasteh v večplastni strukturi HBC/C<sub>60</sub> na učinkovitost transporta naboja. Kontrolirano medsebojno prileganje heterogenih molekul donorskoga in akceptorskega tipa prispeva k višji učinkovitosti v fotovoltaičnih elementih.

Ugotovili smo optimalne parametre za pripravo plasti aminosilanskih molekul na silicijevi podlagi, ki so uporabljene v senzorjih plinov.

Pri študiju interakcije v med tankimi organskih polprevodniških plastmi Cu-ftalocianinov - CuPC in polikristaliničnimi kovinskimi podlagami Au, Ag in Cu z namenom študija termične stabilnosti teh plasti smo potrdili hipotezo, da je termična stabilnost CuPC plasti odvisna od kovinske podlage.

Testirali smo metodo masne spektroskopije s sekundarnimi ioni – SIMS, ki se je pokazala za zelo koristno pri preiskavi organsko in anorganskih heterogenih materialov. S to metodo smo dosegli visoko lateralno ločljivost, visoko molekularno in površinsko občutljivost ter možnost profilne analize večplastnih organskih struktur.

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

Med izvedbo tega projekta ni prišlo do večjih sprememb v raziskovalnem programu ali v sestavi projektne skupine.

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

Znanstveni dosežek			
1.	COBISS ID	2547556	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Oblikovno usklajen stik donorskih in akceptorskih molekul določa

		učinkovitost fotovoltaičnih elementov
	ANG	Donor-acceptor shape matching drives performance in photovoltaics
Opis	SLO	<p>Prilagajanje molekul na donorsko akceptorskih (D/A) faznih mejah, predstavlja nove smeri v razvoju organskih fotovoltaičnih elementov, ki po učinkovitosti za red velikosti prekašajo sorodne elemente s ploščatim donorjem. V sklopu meritev elektronske strukture hetero-organskih stikov smo proučevali heterosestave polickličnih aromatskih ogljikovodikov, ki izkoriščajo dobro prileganje oblike staknjenih D/A molekul na nanometrični skali (donor je raven/upognjen hexabenzocoronen; f-/c-HBC, acceptor je fuleren, C60). Meritve resonančne fotoelektronske spektroskopije podprte z numeričnimi izračuni v okviru teorije gostotnih funkcionalov kažejo, da omogoča oblikovno usklajen molekulski stik c-HBC/C60 v primerjavi s ploskim f-HBC/C60 bistveno hitrejši prenos naboja oziroma, bistveno hitrejšo disociacijo vzbujenega excitona ob heteroorganskem stiku. Naši izsledki nadalje kažejo, da se v razsežni plasti boljša sklopitev D/A stika odraža tudi v izrazitejšem mešanju obeh komponent, kar vodi do večjega aktivnega področja organskega nanosa, oboje pa prispeva k višji učinkovitosti v fotovoltaičnih elementih.</p> <p>Članek je izšel v reviji z visokim faktorjem vpliva (IF=14.0)</p>
	ANG	<p>While the demonstrated power conversion efficiency of organic photovoltaics (OPVs) now exceeds 10%, new design rules are required to tailor interfaces at the molecular level for optimal exciton dissociation and charge transport in higher efficiency devices. We show that molecular shape-complementarity between donors and acceptors can drive performance in OPV devices. Using core hole clock (CHC) X-ray spectroscopy and density functional theory (DFT), we compare the electronic coupling, assembly, and charge transfer rates at the interface between C60 acceptors and flat- or contorted-hexabenzocorone (HBC) donors. The HBC donors have similar optoelectronic properties but differ in molecular contortion and shape matching to the fullerene acceptors. We show that shape-complementarity drives self-assembly of an intermixed morphology with a donor/acceptor (D/A) ball-and-socket interface, which enables faster electron transfer from HBC to C60. The supramolecular assembly and faster electron transfer rates in the shape complementary heterojunction lead to a larger active volume and enhanced exciton dissociation rate. This work provides fundamental mechanistic insights on the improved efficiency of organic photovoltaic devices that incorporate these concave/convex D/A materials.</p>
Objavljeno v		<p>Wiley-VCH; Advanced energy materials; 2013; Vol. 3, iss. 7; str. 894-902; Impact Factor: 14.385; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.554; A<sup>+</sup>: 1; A': 1; WoS: EI, ID, PM, UB, UK; Avtorji / Authors: Schiros Theanne, Kladnik Gregor, Cvetko Dean</p>
Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek
2.	COBISS ID	26125351
Naslov	SLO	Dinamika prenos naboja v pi-sklopljenih molekulah
	ANG	Quantifying through-space charge transfer dynamics in pi-coupled molecular systems
Opis	SLO	Razumevanje prenosa naboja v hibridnih sistemih med tankimi organskimi plastmi in anorgansko podlago je osrednjega pomena za načrtovanje materialov za hibridne mikroelektronske naprave. Vendar je natančna kvantitativna analiza prenosa naboja zelo omejena zaradi nedoločene morfologije molekulski plasti. Z metodo resonančne fotoelektronske spektroskopije smo izmerili dinamiko prenosa naboja v področju fs v različnih molekulah ciklofanov, ki kažejo pi sklopitev. Ugotovili smo, kako je prenos naboja povezan z jakostjo sklopitve v aromatskem obroču.

		<i>ANG</i>	Understanding the role of intermolecular interaction on charge transfer characteristics in $n$ -stacked molecular systems is central to the rational design of hybrid electronic materials. However, a quantitative study of charge transfer in such systems is often difficult because of poor control over molecular morphology. Using resonant photoemission spectroscopy we studied the femtosecond charge-transfer dynamics in cyclophanes, which consist of two precisely stacked pi-systems. We attributed difference in charge transfer to the decreased inter-ring electronic coupling.
	Objavljen v		Nature Publishing Group; Nature communications; 2012; Vol. 3; str. 1086-1-1086-7; Impact Factor: 10.015; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.514; A": 1; A': 1; WoS: RO; Avtorji / Authors: Batra Arunabh, Kladnik Gregor, Vázquez Héctor, Meisner Jeffrey S., Floreano Luca, Nuckolls Colin, Cvetko Dean, Morgante Alberto, Venkataraman Latha
	Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek
3.	COBISS ID		1715759   Vir: COBISS.SI
	Naslov	<i>SLO</i>	Vpliv različnih topil na morfologijo silicijeve površine modificirane z APTMS aminosilanom
		<i>ANG</i>	Influence of different solvents on the morphology of APTMS-modified silicon surfaces
	Opis	<i>SLO</i>	Aminosilani tvorijo spontano urejene plasti in tako modificirane površine so uporabne za izdelavo selektivnih senzorjev za pline pri nizkih koncentracijah. V sklopu projekta smo za ta namen študirali in optimizirali pripravo tankih organskih plasti raznih aminosilanov na podlagi iz Si. Tanke silanske plasti smo pripravili s postopkom nanašanja iz raztopine. Preučevali smo učinkovitost depozicije aminosilana APTMS v različnih topilih (voda, etanol, aceton, acetonitril, DMF, toluen). Ugotovili smo, da lahko primerna topila bistveno spremenijo morfološke lastnosti obdelovancev in posledično tudi adsorpcijo različnih snovi oziroma oprijem različnih delcev in tankih plasti. Opazili smo, da nanos silana, ki smo ga izvedli z uporabo topil acetonitrila in toluena, vodi k nastanku hrapave površine z veliko gostoto APTMS polariziranih molekul v obliki otočkov. Površine, ki smo jih spremajali z uporabo N,N-dimetilformamid topila, so bile bolj gladke z manjšo gostoto APTMS otočkov. Ko pa smo uporabili za topilo aceton in etanol, smo dobili gladko površino z zelo majhno gostoto APTMS otočkov.
		<i>ANG</i>	In this study 3-aminopropyltrimethoxysilane (APTMS) was used for the modification of single-crystal silicon wafers (111). We deposited the self-assembled layers from a solution of APTMS in five solvents with different polarities under various reaction conditions. The influence of the different solvents on the morphology of the modified surfaces was studied, since the possible heterogeneity may significantly influence the application of such surfaces. Our results show that the amount of coatings and the morphology of the modified surface strongly depend on the type of solvent. Silanization carried out in acetonitrile and toluene leads to the formation of a rough surface with a large density of APTMS polymerized molecules in the form of islands. The surfaces modified in N,N-dimethylformamide were smoother, with a lower density of APTMS islands. When using acetone and ethanol as a solvent we prepared a smooth, thin, modified surface, with a very low density of the APTMS islands. We discuss the influence of the polarity of the solvents on the morphology of the modified surfaces.
	Objavljen v		North-Holland; Applied Surface Science; 2014; Vol. 315, no. 1; str. 516-522; Impact Factor: 2.538; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 1.361; A": 1; A': 1; WoS: EI, QG, UB, UK; Avtorji / Authors: Jakša Gregor, Štefane Bogdan, Kovač Janez
	Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek

4.	COBISS ID	26934567	Vir: COBISS.SI
	Naslov	<i>SLO</i> Ultra-hiter prenos naboja z interakcijo med Au in N atomi v molekulskih sistemih	
		<i>ANG</i> Ultrafast charge transfer through noncovalent Au-N interactions in molecular systems	
	Opis	<i>SLO</i> V okviru raziskav transporta naboja v organskih stikih smo proučevali vpliv jakosti molekulskih interakcij na hitrost prenosa naboja ob hibridnem molekulskem stiku. Izmerili smo ultrahiter transport vzbujenih elektronov na različnih mestih prototipske molekule 1,4-diaminobenzena (BDA), ki na kontaktni površini Au(111) tvori dve monoplastni fazi s komplementarno adsorpcijsko geometrijo molekul. Iz meritev resonančne rentgenske spektroskopije in povezanih teoretičnih izračunov v okviru teorije gostotnih funkcionalov smo določili delokalizacijsko dinamiko vzbujenih elektronov na različnih mestih plosko- in pokončno- ležečih molekul. Z visoko prostorsko in orbitalno resolucijo smo določili mesta v molekuli BDA, ki omogočajo ultrahiter prenos naboja prek praznih molekulskih orbital in ga povezali s specifično kemično vezavo molekul. Kvantitativno smo izmerili čase delokalizacije vzbujenih elektronov, ki jih omogočajo donorskog/akceptorska sklopitev N-Au, vodikova vez in šibka sklopitev pi orbital aromatskega obroča BDA s površino Au. Dobavljeni rezultati kažejo, da za ultrahiter prenos naboja z organskih molekul ni nujno potrebna močna kovalentna vez s substratom.	
		<i>ANG</i> Charge transfer through non-covalent interactions is crucial to a variety of chemical phenomena. Being weak and nonspecific these interactions often coexist with stronger covalent ones, making it difficult to isolate the transfer efficiency of one type of bond versus another. Within our studies of carrier transport over empty molecular orbitals in adsorbed aromatic molecules we succeeded to map out the preferred pathways of ultrafast carrier transport from organic molecules to the underlying substrate and to relate them with specific type of molecular bonding. With the use of X-ray resonant spectroscopy we studied a model aromatic system, 1,4-benzenediamine (BDA) molecules bound on Au surface through an Au-N donor-acceptor (D/A) bond, as these are known to provide a pathway for electronic conduction in molecular devices. We show that charge delocalization across the D/A bond occurs in less than 500 as. Furthermore, the Au-N bond also enhances delocalization to the substrate from the neighboring carbon sites, demonstrating that fast charge transfer across a metal-organic interface does not require a covalently bonded system.	
	Objavljeno v	American Chemical Society; The journal of physical chemistry. C, Nanomaterials and interfaces; 2013; Vol. 117, issue 32; str. 16477-16484; Impact Factor: 4.835; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.554; A': 1; WoS: EI, NS, PM; Avtorji / Authors: Kladnik Gregor, Cvetko Dean, Batra Arunabh, Dell'Angela Martina, Cossaro Albano, Kamenetska Maria, Venkataraman Latha, Morgante Alberto	
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek	
5.	COBISS ID	36892165	Vir: COBISS.SI
	Naslov	<i>SLO</i> XPS in AFM analiza plasti aminosilanskih molekul z različnimi števili adsorbcijskih mest na silicijevi podlagi	
		<i>ANG</i> XPS and AFM characterization of aminosilanes with different numbers of bondingsites on a silicon wafer	
		Delo opisuje pripravo in karakterizacijo tankih organskih molekularnih plasti aminosilanskih molekul na silicijevu podlago z namenom modificirati silicijeve površine, ki bodo uporabljene v senzorjih plinov. Pripravili smo amino-silanske plasti s postopkom nanašanja iz raztopine na različno obdelane silicijeve rezine. Pripravil in primerjal smo učinkovitost depozicije	

Opis	<i>SLO</i>	treh silanskih materialov, kot so (3-aminopropyl)-trimethoxysilane (APTMS), (3-aminopropyl)-diethoxymethylsilane (APRDMS) in (3-aminopropyl)-ethoxydimethylsilane (APREMS). Preiskali smo vpliv temperature, časa depozicije, izbiro topila, in vrste silanske molekule. Ugotovili smo optimalne parametre priprave, ki jih bomo uporabili pri izdelavi hibridnih senzorjev.
	<i>ANG</i>	This work describes the preparation and characterization of a silicon surface modified by different self-assembled aminopropylsilanes (APS) with the purpose of using them in sensor applications. Single-crystal silicon wafers were modified with aminosilanes that have different numbers of bonding sites: 3-aminopropyltrimethoxysilane (APTMS), 3-aminopropyldiethoxymethylsilane (APRDMS) and 3-aminopropylethoxydimethylsilane (APREMS). We deposited the self-assembled layers from a solution of aminosilanes in toluene under various reaction conditions. The surface composition and the chemical bonding were determined using X-ray photoelectron spectroscopy (XPS). Furthermore, the surface morphology was investigated using atomic force microscopy (AFM). Our results show that the reactivity with the Si-oxide layer and the polymerization of aminosilanes depend on the number of possible bonding sites. The APTMS reacted the most intensively with the Si-oxide layer; a less intensive reaction was observed for the APRDMS; and the least intensive reaction was observed for the APREMS.
Objavljeno v		Heyden & Son; Surface and interface analysis; 2013; Vol. 45, no. 11/12; str. 1709-1713; Impact Factor: 1.393; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 3.585; WoS: EI; Avtorji / Authors: Jakša Gregor, Štefane Bogdan, Kovač Janez
Tipologija	1.01	Izvirni znanstveni članek

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

	Družbeno-ekonomski dosežek			
1.	COBISS ID		Vir: vpis v poročilo	
	Naslov	<i>SLO</i>	Organizacija mednarodnega vakuumskega kongresa IVC-19	
Opis	<i>SLO</i>	Organisation of International Vacuum Congress IVC-19		
		V Parizu je od 9. do 13. 9. 2013 potekal 19. mednarodni vakuumski kongres IVC-19, ki se ga je udeležilo 2500 udeležencev iz 65 držav. Kongresu je bilo pridruženih še šest drugih konferenc. Vodja projektne skupine Janez Kovač je bil član ožjega organizacijskega odbora kongresa, ostali člani projektne skupine Dean Cvetko in Miran Mozetič pa so bili člani mednarodnih znanstvenih odborov sekcijs za znanost o površinah in sekcijs za nanotehnologije. Soorganizacija tega kongresa je močno promovirala našo projektno skupino.		
	<i>ANG</i>	International Vacuum Congress - IVC-19 together with six joined conferences took place in Paris, France from September 9 to 13, 2013. About 2500 participants from 65 countries took part of this large event. . Janez Kovač, leader of the project group was a member of the International organizing committee of this congress and Dean Cvetko and Miran Mozetič were members of International scientific committees for Surface Science and for Nanoscience and Technology. Co-organization of the IVC 19 congress promoted strongly our project group.		
		Šifra	B.01 Organizator znanstvenega srečanja	
Objavljeno v		<a href="http://www.ivc19.com/organisation/committees.html">http://www.ivc19.com/organisation/committees.html</a>		
Tipologija		3.25	Druga izvedena dela	

2.	COBISS ID	2481764	Vir: COBISS.SI
Naslov	<i>SLO</i>	Elektronska struktura in prenos naboja v nanostrukturah in na hibridnih faznih mejah	
	<i>ANG</i>	Electronic structure and charge transfer at nanostructures and hybrid interfaces	
Opis	<i>SLO</i>	S pomočjo resonančne spektroskopije in drugih tehnik je dr. Gregor Kladnik pod mentorstvom dr. Deana Cvetka raziskal jakost sklopitev, molekulske vezi ter dinamiko nosilcev naboja preko faznih mej v štirih organskih heterosistemih z možnim pomembnim vplivom na uporabo v visoki tehnologiji. Določil je čase prenosa naboja skozi molekulska stičišča na femtosekundni časovni skali. Natančne raziskave organsko/kovinskih stičnih plasti so omogočile določiti morfologijo in adsorpcijsko geometrijo molekul ter ju povezati z elektronskimi lastnostmi v hibridnih stičnih mejah.	
	<i>ANG</i>	Detailed studies of organic/metal interfaces was performed by dr. Gregor Kladnik under supervision of dr. Dean Cvetko to characterize the organic layer morphology and molecular adsorption geometry and relate them to the electronic properties at the hybrid interfaces. In particular, coupling strengths, molecular bonding and charge carrier dynamics across the interface were studied by X-ray resonant spectroscopy in four organic heterosystems with potentially high impact for technological applications.	
Šifra		D.09	Mentorstvo doktorandom
Objavljeno v		[G. Kladnik]; 2012; VIII, 248 str.; Avtorji / Authors: Kladnik Gregor	
Tipologija		2.08	Doktorska disertacija
3.	COBISS ID	26578727	Vir: COBISS.SI
Naslov	<i>SLO</i>	Uspešno končan štiriletni EU FP7 projekt "PlasmaNice" 15 evropskih partnerjev s področja uporabe zračne plazme	
	<i>ANG</i>	Successfully finished four years long EU FP7 project PlasmaNice for applications of atmospheric plasmas involving 15 partners	
Opis	<i>SLO</i>	V letu 2012 se je uspešno zaključil štiriletni EU FP7 projekt "Atmospheric Plasmas for Nanoscale Industrial Surface Processing – PlasmaNice", (NMP-IP 211473), na temo industrijske uporabe atmosferske plazme za obdelavo in nanašanje organskih plasti nanometrskih dimenziij. Projekt je združeval 15 evropskih partnerjev, med njimi tudi našo projektno skupino, ki jo je vodil dr. Janez Kovač. Rezultat projekta je nova opreme in tehnologija za nanašanje tankih silanskih funkcionalnih hibridnih plasti v kombinaciji z zračno plazmo v industrijskem okolju in pri velikih hitrostih na različne podlage. Prispevek naše skupine je bila natančna preiskava površin plazemsko nanešenih sol-gel prevlek, pri kateri smo ugotovili povezave med plazemskimi procesnimi parametri, stopnjo funkcionalizacije površin in debelino ter strukturo plasti.	
	<i>ANG</i>	After four years in 2012 the European FP7 project "Atmospheric plasmas for nanoscale industrial surface processing - PlasmaNice" finished successfully. In the project 15 European partners from research and industry areas were involved as well as our group lead by dr. Janez Kovač. The results of the PlasmaNice project are a new equipment and technology for industrial in-line deposition of silane-based organic functional coatings by atmospheric plasmas. Our group carried out precise surface characterization of plasma deposited sol-gel coatings using XPS, AFM and TOF-SIMS methods. We determined the correlation between the plasma process parameters, degree of surface functionalization and thickness of the deposited coatings.	
Šifra		D.01	Vodenje/koordiniranje (mednarodnih in domačih) projektov
Objavljeno v		s. n.]; 2012; 31 str.; Avtorji / Authors: Lahti Johanna, Kovač Janez	

	Tipologija	2.14 Projektna dokumentacija (idejni projekt, izvedbeni projekt)	
4.	COBISS ID	2700388	Vir: COBISS.SI
	Naslov	<i>SLO</i>	Hitri prenos nosilcen naboja preko fazne meje kovina/molekularna plast z metodo rentgenske fotoemisije
		<i>ANG</i>	Pathways of fast charge transfer across a metal/molecule interface measured by resonant X-ray photoemission
	Opis	<i>SLO</i>	Vabljeno predavanje Deana Cvetka na konferenci Join Vacuum conference – JVC-15 na Dunaju, Avstrija, junij 2014
		<i>ANG</i>	Invited lecture of Dean Cvetko at Joit Vacuum conference - 15, June 2014, Vienna, Austria
	Šifra	B.04	Vabljeno predavanje
	Objavljeno v	s. n.]; Programme schedule and book of abstracts; 2014; Str. 40; Avtorji / Authors: Cvetko Dean, Kladnik Gregor, Batra Arunabh, Cossaro Albano, Venkataraman Latha, Morgante Alberto	
	Tipologija	1.10	Objavljeni povzetek znanstvenega prispevka na konferenci (vabljeno predavanje)

## 8.Druži pomembni rezultati projetne skupine<sup>7</sup>

Prvič v Sloveniji je bila uvedena nova metoda ToF-SIMS za preiskavo tankih organskih plasti

V letu 2012 smo člani projektne skupine uveli novo metodo za preiskavo površin, to je masna spektroskopija sekundarnih ionov s kratico ToF-SIMS. Metoda je tako prvič uvedena v Sloveniji. Omogočila bo natančne preiskave kemijske strukture površin, še posebej pa je primerna za preiskave tankih organskih plasti, kot tudi za preiskave površin drugih anorganskih materialov, kot so polprevodniki. Metoda omogoča zajemanje slik kemijske sestave površin z lateralno ločljivostjo do 50 nm in zajemanje masnih spektrov do 10.000 masnih enot z visoko masno ločljivostjo. Z novo pridobitvijo bomo tako lahko sledili svetovnim trendom pri razvoju, obdelavi in karakterizaciji novih materialov.

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

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

*SLO*

Raziskave v okviru izvedenega projekta so osvetile osnovne procese med formiranjem in rastjo tankih organskih plasti na anorganskih podlagah. Prišli smo do novih spoznanj o vlogi medmolekulske interakcije in interakcije z anorgansko podlogo. Ta spoznanja bodo prispevala k boljšemu razumevanju formiranja organsko-anorganskih faznih mej. Osvetli smo vlogo omejene geometrije in kvantizacije elektronskih stanj na formiranje prevodnih heterogenih plasti, ki imajo možne implikacije v tehnologiji organskih polprevodnikov. V okviru izvedenega projekta smo zato študirali začetne faze formiranja organsko-anorganske fazne meje, vrste kemijskih vezi na meji, dinamiko nosilcev naboja ob fazni meji, elektronsko in geometrijsko strukturo ter morfologijo plasti organskih molekul in ter njihovo termično stabilnost.

Veliko pozornosti smo posvetili temu, da smo na stiku organski polprevodnik/kovina dodatno formirali vmesno organsko monoplast, na kateri smo nato pripravili želeno sekundarno polprevodniško organsko plast. Pokazali smo, da vmesna plast zmanjša in prilagodi mehanske napetosti na organsko/anorganskem stiku in zato izboljša elektronske transportne lastnosti. Ker je dinamika prenosa naboja v kompleksnih organskih molekulah močno odvisna od stopnje konjugacije aromatskega obroča v molekuli in vrste funkcionalne skupine, preko katere se organska molekula kovalentno veže na kovinsko elektrodo, smo za vmesno plast uporabili molekule z različnimi funkcionalnimi skupinami.

Pri preiskavah transporta naboja preko hibridne organske fazne meje smo študirali dinamične pojave, kot so odvisnost hitrosti prenosa naboja od vrste kemične vezi med organskimi

molekulami. V sistemu prototipske molekule 1,4 benzenediamina (BDA)/Au smo ugotovili, da je mogoče doseči hiter prenos naboja med organskimi molekulami tudi v sistemih, kjer ni prisotna močna kovalentna vez med organsko molekulo in podlago.

Pojasnili smo vpliv medsebojnega prileganja molekul v heterogenih organskih plasteh v večplastni strukturi HBC/C<sub>60</sub> na učinkovitost transporta naboja. Kontrolirano medsebojno prileganje heterogenih molekul donorskoga in akceptorskega tipa prispeva k hitrejši disociaciji ekscitonov na stični meji in s tem k višji učinkovitosti v heteroorganiskih fotovoltaičnih elementih.

Optimizirali smo pripravo organskih plasti na osnovi aminosilanskih molekul alifatskega in aromatskega tipa s postopkom nanašanja na Si podlago iz raztopine. Ugotovili smo, da so ponovljivi rezultati možni le pri strogo kontroliranih pogojih nanosa kot so ustrezno predhodno pripravljena površina, suha topila, inertna atmosfera, krajsi časi nanosa, nižje temperature nanosa, nizke koncentracije organskih molekul... Pripravljene aminosilanske plasti na siliciju so bile uporabljene v senzorjih za selektivno detekcijo plinskih molekul v področju nizkih koncentracij.

Raziskali smo še nastanek novih faz na faznih mejah v večplastnih strukturah C/Si/C/Si/C, ki smo jih obstreljevali z ionskimi curki, termično stabilnost kovinskih ftalocianinov CuPC na podlagah iz Au, Ag in Cu in začetno fazo rasti plasti Pb na podlagi Ge(001).

ANG

The results of the completed research project can provide several answers to fundamental issues of thin organic film formation on metallic substrates. Specifically, the role of intra molecular interaction as well organic film binding to the substrate have been explored throughout the initial stages of growth where, growth kinetics, interface energetics as well as size quantization play an important role. Our results elucidate the fundamental physics and chemistry involved in the organic/inorganic interface formation with a possible impact on the organic semiconductor technology.

In particular we studied the introduction of an intermediate self-assembled monolayer of organic molecules as a buffer layer, and growing the second semiconductor organic layer on top of it. We showed that this is a viable route to reduce the effects of strain at the interfaces and improve electronic transport characteristic. Electronic and optical properties of the organic devices depend on the degree of conjugation of the aromatic rings within the molecule and on the functional group capable to form covalent bond of SAM layer to metal surface. Therefore molecules with different functional groups like silanes, amine and carboxylate were examined in the frame of the project.

In the system of the model aromatic layer 1,4-benzenediamine (BDA) on Au substrate we studied transport dynamics of charge carriers over hybide interface as a function of a specific type of chemical bonding with organic molecule. Our results evidence, that contrary to general belief, ultrafast charge transfer across a hybrid junction does not require a covalently bonded system.

In the heterogeneous organic multilayer of hexabenzocorone (HBC) and C<sub>60</sub> layers we studied electronic coupling, level alignment and charge transfer rates at the heteroorganic interface. We showed that shape complementary of donor acceptor molecules in the heterojunction lead to improved efficiency of organic photovoltaic devices.

We studied the role of intermolecular interactions on charge transfer in pi-stacked layers of cyclophanes and demonstrate that through-space charge transfer between aromatic rings depend strongly on the decreased inter-ring distance.

We studied also the formation of new phases in multilayer system C/Si/C/Si/C which was induced by irradiation with ion beam, the thermal stability of metallic phtalocianes CuPC on the Au, Ag and Cu substrates and the early stages of Pb/Ge(001).

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

SLO

Tematika elektronskih lastnosti v hibridnih sistemih, ki smo jo študirali pri izvedenem temeljnem raziskovalnem projektu, je zelo aktualna in ima veliko možnih aplikacij na področju tehnologij elektronskih elementov in materialov, ki je v Sloveniji sorazmerno dobro razvito. Organske polprevodniške strukture so relativno preproste za izdelavo in se lahko pripravljamjo v manjših, specialnih serijah z veliko dodano vrednostjo. V prihodnosti bodo v veliki meri uporabljene za fotovoltaične naprave, sončne celice, svetlobne elemente, tranzistorske

elemente, senzorje in podobno.

Pridobljeno znanje iz tega projekta bo posredno prispevalo k uvedbi novih izdelkov v slovenski industriji elektronskih elementov.

Rezultati projekta so bili objavljeni v pomembnih znanstvenih revijah z visokim faktorjem vpliva in s tem smo pripomogli do večje prepoznavnosti slovenske znanosti in do uveljavitve naše raziskovalne skupine. Člani projektne skupine smo predstavili naše rezultate na vabljenih predavanjih na menarodnih konferencah in tujih Univerzah in s tem promovirali naše raziskave. Eksperimentalno delo slovenskih raziskovalcev na vrhunski eksperimentalni opremi tržaškega sinhrotrona Elettra v okviru izvedenega projekta je domačim raziskovalcem razširilo možnosti uporabe najsodobnejše raziskovalne opreme, ki ne obstaja v Sloveniji, tudi v bodoče. To sodelovanje je omogočilo tudi dostop do kvalitetnih znanj in formirjanu tesnih raziskovalnih vezi s prepoznavnimi skupinami mednarodnih raziskovalcev.

Raziskovalno delo v okviru projekta je bilo pomembno tudi za izobraževanje in vzgojo kadrov, saj sta bila pri njem vključena dva mlada raziskovalca, ki sta izdelala svoje doktorske disertacije, v raziskave pa so bili vključeni tudi dodiplomski študenti med praktičnim delom v laboratorijih. Pri izvajaju raziskav tega projekta je bila prvič v Sloveniji vključena tudi nova analizna metoda in sicer Masna spektrometrija sekundarnih ionov (ToF SIMS), ki je zelo zahtevna metoda in primerna tako za analizo tankih organskih plasti kot polprevodniških struktur.

Znanja pridobljena med projektom bodo uporabljena pri nadaljnjih sodelavah s slovenskimi industrijskimi partnerji v obliki servisnih analiznih uslug ali pri izvedbi skupnih projektov.

ANG

A subject of the completed project is very actual and has many possible applications in the field of electronics components and materials, which is relatively well developed in Slovenia. Organic semiconductor structures may be produced on small scale and with high added value. In the future they will be used extensively for photovoltaic devices, for solar cells, lightening elements, transistor elements, sensors... Therefore the knowledge obtained within this project could contribute to introduction of new products in Slovenian industry of electronics components. Results of this project were published in several prestigious scientific journals with very high impact factor. In this way we promoted Slovenian science and our project group. Members of our research team presented the obtained results in a form of invited lectures at several international conferences and at foreign Universities.

The research activities within this project had a strong impact on education and formation of young scientists and PhD students that have been included in the scientific formation, and have directly resulted in two PhD dissertations. Several BSc and Masters students have also been involved in the research activities related to this project of our laboratories.

Within the performed project, part of the research activity was done in collaboration of Slovenian scientists with the Laboratory IOM-CNR and synchrotron light source Elettra in Trieste which is the worldwide unique research facility, which resulted in established scientific ties that will extend in the future, far beyond the completion of this project.

During the course of this project a unique experimental technique in Slovenia i.e. Secondary ion mass spectroscopy (ToF-SIMS) was introduced and implemented in our laboratory, which is a very complex and advanced method for characterization of thin organic films and semiconducting substrates.

The knowledge obtained in this project will be explored in further collaboration with Slovenian industrial partners either as service analyses or through joint projects.

## **10.Samo za aplikativne projekte in podoktorske projekte iz gospodarstva!**

**Označite, katerega od navedenih ciljev ste si zastavili pri projektu, katere konkretnе 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 checked="" 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="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov <input type="button" value="▼"/>
<b>F.03</b>	<b>Večja usposobljenost raziskovalno-razvojnega osebja</b>
	Zastavljen cilj <input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat <input type="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov <input type="button" value="▼"/>
<b>F.04</b>	<b>Dvig tehnološke ravni</b>
	Zastavljen cilj <input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat <input type="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov <input type="button" value="▼"/>
<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="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov <input type="button" value="▼"/>
<b>F.06</b>	<b>Razvoj novega izdelka</b>
	Zastavljen cilj <input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat <input type="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov <input type="button" value="▼"/>
<b>F.07</b>	<b>Izboljšanje obstoječega izdelka</b>
	Zastavljen cilj <input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat <input type="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov <input type="button" value="▼"/>
<b>F.08</b>	<b>Razvoj in izdelava prototipa</b>
	Zastavljen cilj <input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat <input type="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov <input type="button" value="▼"/>
<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="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov <input type="button" value="▼"/>
<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="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov <input type="button" value="▼"/>
<b>F.11</b>	<b>Razvoj nove storitve</b>
	Zastavljen cilj <input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE

	Rezultat	<input type="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="button" value="▼"/>
<b>F.12</b>	<b>Izboljšanje obstoječe storitve</b>	
	Zastavljen cilj	<input checked="" type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="button" value="▼"/>
<b>F.13</b>	<b>Razvoj novih proizvodnih metod in instrumentov oz. proizvodnih procesov</b>	
	Zastavljen cilj	<input checked="" type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="button" value="▼"/>
<b>F.14</b>	<b>Izboljšanje obstoječih proizvodnih metod in instrumentov oz. proizvodnih procesov</b>	
	Zastavljen cilj	<input checked="" type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="button" value="▼"/>
<b>F.15</b>	<b>Razvoj novega informacijskega sistema/podatkovnih baz</b>	
	Zastavljen cilj	<input checked="" type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="button" value="▼"/>
<b>F.16</b>	<b>Izboljšanje obstoječega informacijskega sistema/podatkovnih baz</b>	
	Zastavljen cilj	<input checked="" type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="button" value="▼"/>
<b>F.17</b>	<b>Prenos obstoječih tehnologij, znanj, metod in postopkov v prakso</b>	
	Zastavljen cilj	<input checked="" type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="button" value="▼"/>
<b>F.18</b>	<b>Posredovanje novih znanj neposrednim uporabnikom (seminarji, forumi, konference)</b>	
	Zastavljen cilj	<input checked="" type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="button" value="▼"/>
<b>F.19</b>	<b>Znanje, ki vodi k ustanovitvi novega podjetja ("spin off")</b>	
	Zastavljen cilj	<input checked="" type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="button" value="▼"/>
<b>F.20</b>	<b>Ustanovitev novega podjetja ("spin off")</b>	
	Zastavljen cilj	<input checked="" type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="button" value="▼"/>

	Uporaba rezultatov	<input type="button" value="▼"/>
<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="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="button" value="▼"/>
<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="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="button" value="▼"/>
<b>F.23</b>	<b>Razvoj novih sistemskih, normativnih, programskev in metodoloških rešitev</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="button" value="▼"/>
<b>F.24</b>	<b>Izboljšanje obstoječih sistemskih, normativnih, programskev in metodoloških rešitev</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="button" value="▼"/>
<b>F.25</b>	<b>Razvoj novih organizacijskih in upravljaških rešitev</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="button" value="▼"/>
<b>F.26</b>	<b>Izboljšanje obstoječih organizacijskih in upravljaških rešitev</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="button" value="▼"/>
<b>F.27</b>	<b>Prispevek k ohranjanju/varovanje naravne in kulturne dediščine</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="button" value="▼"/>
<b>F.28</b>	<b>Priprava/organizacija razstave</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="button" value="▼"/>
<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="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="button" value="▼"/>

<b>F.30</b>	<b>Strokovna ocena stanja</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="button" value="▼"/>
<b>F.31</b>	<b>Razvoj standardov</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="button" value="▼"/>
<b>F.32</b>	<b>Mednarodni patent</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="button" value="▼"/>
<b>F.33</b>	<b>Patent v Sloveniji</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="button" value="▼"/>
<b>F.34</b>	<b>Svetovalna dejavnost</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="button" value="▼"/>
<b>F.35</b>	<b>Drugo</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="button" value="▼"/>

**Komentar**

--

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

	<b>Vpliv</b>	<b>Ni vpliva</b>	<b>Majhen vpliv</b>	<b>Srednji vpliv</b>	<b>Velik vpliv</b>	
<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="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="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 uteviljenih stroškov projekta:			%
	Najpomembnejši rezultati raziskovanja za sofinancerja			Šifra
		1.		
		2.		
		3.		
		4.		
		5.		
Komentar				
Ocena				

**13.Izjemni dosežek v letu 2014<sup>12</sup>****13.1. Izjemni znanstveni dosežek**

--

**13.2. Izjemni družbeno-ekonomski dosežek**

--

**C. IZJAVE**

Podpisani izjavljjam/o, da:

- so vsi podatki, ki jih navajamo v poročilu, resnični in točni
- se strinjam/o 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 obliku
- so z vsebino zaključnega poročila seznanjeni in se strinjajo vsi soizvajalci projekta

**Podpisi:**

*zastopnik oz. pooblaščena oseba  
raziskovalne organizacije:*

in

*vodja raziskovalnega projekta:*

Institut "Jožef Stefan"

Janez Kovač

---

**ŽIG**

Kraj in datum:

Ljubljana

16.3.2015

**Oznaka poročila: ARRS-RPROJ-ZP-2015/204**

---

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-ekonomskie 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 ustavitev 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 / prepišite skladno z obrazcem "izjava sofinancerja" <http://www.arrs.gov.si/sl/progproj/rproj/gradivo/>, ki ga mora izpolniti sofinancer. Podpisani 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 2014 (največ 1000 znakov, vključno s presledki). Za dosežek pripravite diapositiv, 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). Diapositiv/-a priložite kot pripomoko/-i k temu poročilu. Vzorec diapositiva 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/2015 v1.00a  
2B-BF-F4-3A-71-71-CE-AC-3F-9D-D7-10-9C-13-6F-06-CC-F7-BE-C2