



ZAKLJUČNO POROČILO O REZULTATIH RAZISKOVALNEGA PROGRAMA

A. PODATKI O RAZISKOVALNEM PROGRAMU

1. Osnovni podatki o raziskovalnem programu

Šifra programa	P2-0377	
Naslov programa	Heterogeni fotokatalitični procesi: pridobivanje vodika, čiščenje vode in zraka	
Vodja programa	11991 Matjaž Valant	
Obseg raziskovalnih ur	5516	
Cenovni razred	F	
Trajanje programa	01.2009 - 12.2012	
Izvajalci raziskovalnega programa (javne raziskovalne organizacije - JRO in/ali RO s koncesijo)	1540 794	Univerza v Novi Gorici Univerza v Mariboru, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo
Raziskovalno področje po šifrantu ARRS	2 2.04	TEHNIKA Materiali
Družbeno-ekonomski cilj	05.	Energija

2. Raziskovalno področje po šifrantu FOS¹

Šifra	2.05	
- Veda	2 Tehniške in tehnološke vede	
- Področje	2.05 Materiali	

B. REZULTATI IN DOSEŽKI RAZISKOVALNEGA PROGRAMA

3. Povzetek raziskovalnega programa²

SLO

Raziskovalna vsebina predloženega programa je razdeljena v tri večje segmente, ki so do določene mere vsebinsko zaključeni vendar pa medsebojno močno povezani. Ti segmenti so

- Segment 1: študij fotokatalize in razvoj novih katalizatorjev za cepitev vode in pridobivanje vodika

Glavni cilj tega raziskovalnega segmenta je razvoj novih fotokatalizatorjev na

osnovi kovinskih oksidov z boljšim kvantnim izkoristkom in odpornostjo proti fotokoroziji. V te namene bomo raziskovali polprevodnike na osnovi oksidnih materialov, ki po različnih strukturnih karakteristikah prestavljajo novost v tovrstnih raziskavah. Raziskave vključujejo študij sinteze in fotokatalitske učinkovitosti bizmutovih niobatov in tantalatov ter materialov kot sta npr. Al_2O_3 in Fe_2O_3 , ki predstavljajo velik tehnički izziv zaradi možnosti masovne uporabe nizkocenovnega katalizatorja.

Segment 2: modelne študije in optimizacija (mikro)reaktorjev za pridobivanje in izkoriščanje vodika

Osnovni namen raziskav v tem segmentu je idejno in modelno razviti mikroreaktor za fotokatalitično cepitev vode. Pri načrtovanju fotokatalitskih sistemov sta izbiri katalizatorja in delovnih pogojev najbolj pomembni in omejujoči odločitvi, zato je implementacija sistematičnih metod za iskanje optimalnih delovnih pogojev in značilnosti katalizatorja bistvena. Fotoreaktor mora biti zasnovan tako, da v njem lahko izvajamo reakcije tako s praškastim kot tudi z imobiliziranim katalizatorjem, in to ne glede na to, ali imamo opravka s standardnim ali novo pripravljenim in razvitim materialom.

- **Segment 3:** študij fotokatalize in razvoj katalizatorjev za čiščenje vode in zraka

Ta segment obravnava raziskave fotokatalitičnih procesov na mejni površini trdno tekoče in trdno-plinasto z namenom, da bi razvili nov, učinkovit katalizator ter konstruirali in optimizirali celoten piloten fotokatalitski sistem za čiščenje vode in/ali zraka. Raziskave vključujejo sol-gel sintezo fotokatalizatorjev na osnovi TiO_2 prahu in tankih plasti ter analizo njihovih fotokatalitske aktivnosti, ki jo izvajamo v posebej izdelanih reaktorjih za študij razgradnje polutantov v tekoči in plinski fazi.

Znotraj prvega segmenta so angažirani raziskovalci z bogatimi izkušnjami na področju sinteze anorganskih materialov ter njihove karakterizacije (predvsem Laboratorij za raziskave materialov, UNG). Ob njih na študiju osnovnih fotokatalitičnih procesov sodelujejo še partnerji iz Laboratorij za raziskave o okolje, UNG. Skupaj raziskujejo procese kot so molekularni mehanizem oksidacije in redukcije vode na površini polprevodnika, prenos naboja med fazami in, najpomembnejše, osredotočajo se na soodvisnosti fotokatalitske aktivnosti od strukturnih in elektronskih faktorjev. V drugem segmentu, ki se večinoma izvaja na Fakulteti za kemijo in kemijsko tehnologijo UN-MB, procesni parametri in katalizatorske karakteristike, pridobljene v predhodnih raziskavah predstavljajo vhodne podatke za modeliranje in optimizacijo (mikro)reaktorjev

ANG

The research content of the proposed programme is divided in three major segments, which are to some extent self-standing but research-wise mutually very related. These segments are:

- **Segment 1:** studies of photocatalysis and development of new catalysts for hydrogen production

The main goal within this research segment is a development of new photocatalysts, based on metal oxides, which exhibit better quantum efficiency and photo-corrosion resistivity. We study transition metal-oxide semiconductor materials that because of their unique structural characteristics represent novelty in the research of this type. This involves a synthesis and studies of Bi-based niobates and tantalates and materials such as Al_2O_3 or Fe_2O_3 , which represent a high technological challenge because of a potential for a mass application of a

low-cost catalyst.

- **Segment 2:** modelling and optimization of (micro)reactors for hydrogen production and conversion

The aim of the research segment is development of principles and models for a micro-reactor for photo-catalytic water splitting. In designing of photo-catalytic systems, the selection of the catalyst and operating conditions are the most important and limiting decisions. Therefore, implementing systematic methods to find optimal operating conditions and catalyst characteristics is essential.

- **Segment 3:** studies of photocatalysis and development of new catalysts for water and air purification

This segment addresses the studies of photocatalysis at solid-liquid and solid-gas interface with the aim to develop new efficient catalysts and to construct the entire photocatalytic systems for water and air purification. The research includes studies of sol-gel synthesis of photocatalysts based on TiO_2 in the form of powders or thin films and analysis of their photocatalytic activity in reactors specially designed for monitoring decomposition of pollutant in liquid and gas phase.

The research within the first segment involves researchers with strong experiences in the field of inorganic material synthesis and material characterisation (mainly Materials Research Laboratory, UNG). In addition, the researchers from Laboratory for Research in Environment of UNG contribute on the research of fundamental photocatalytic processes, which are of equal importance also for photocatalytic water and air purification. They investigate processes such as molecular mechanisms of oxidation and reduction of water on a surface of semiconductors, charge transfer between phases in the system, and, the most importantly, they focus on correlation between photocatalytic activity, structural and electronic characteristics of catalysts. Within the second segment, which in a major part is performed at Faculty for Chemistry and Chemical Engineering of UN-MB, the processing parameters and catalysts characteristics, determined during the initial research, will represent input data for the modelling and optimization of (micro)reactors.

4.Poročilo o realizaciji predloženega programa dela na raziskovalnem programu³

SLO

Segment 1: študij fotokatalize in razvoj novih katalizatorjev za cepitev vode in pridobivanje vodika

Sintetizirali smo Nd-dopirane $BiVO_4$ in Bi-dopirane $NdVO_4$ spojine ter karakterizirali njihove strukturne in funkcionalne lastnosti. Rezultati so pokazali, da v spojni $NdVO_4$ Bi zamenja Nd v deležu < 0.5 % mol, medtem ko Nd ne more zamenjati Bi v monokliničnem $BiVO_4$. Z dopiranjem Bi v $NdVO_4$ smo dosegli zmanjšanje energijske vrzeli za 0.5 eV, iz 3.5 eV na 3 eV.

Obširne raziskave smo izvedeli na Bi-pirokorih kjer smo sintetizirali do sedaj še neznan piroklor iz sistema Bi_2O_3 - Fe_2O_3 - TeO_2 , ki se odlikuje s tem, da ima med vsemi Bi-piroklori najožji prepovedan pas. To nakazuje na zelo dobro fotokatalitsko aktivnost. Pripravili smo nanodelce večih tipov piroklorov in potrdili pričakovano aktivnost.

Pripravili smo tudi različne kompozitne nanomateriale na osnovi ZnS and ZnO . Ugotovili smo, da so vsi pripravljeni nanomateriali (nanopalčke) fotoaktivni na UV svetlobi. Iz absorpcijskih spektrov smo ugotovili, da si energijske vrzeli sledijo v

zaporedju ZnS>ZnS/ZnO>ZnO. Analizirali smo razvoj morfologije in fotoaktivnosti pri kontrolirani konverziji ZnS v ZnO.

Raziskovali smo možnosti uporabe zunanjih perturbacij za kontrolo in prilagajanje elektronskih energijskih pasov širokopasovnih polprevodnikov. Izračunali smo prebojne napetosti ter študirali odvisnost elektronskih pasov od jakosti zunanjega električnega polja. Ugotovili smo veliko anizotropijo električnih lastnosti ter dokazal, da lahko z zunanjim poljem bistveno izboljšamo fotokatalitsko aktivnost.

Z DFT modeliranjem smo izvedli podrobno in sistematično raziskavo serije dvanajstih trdnih raztopin Fe_2O_3 - Cr_2O_3 - Al_2O_3 s korundno strukturo. Naši rezultati so pokazali na nove možnosti za izboljšane elektronske in optične lastnosti v tem trikomponentnem sistemu. Za izvajanje te študije smo pridobili projekt HPC Europa, ki je omogočil dostop do visokozmogljivih računalniških kapacetet na BSC, Barcelona.

Segment 2: modelne študije in optimizacija (mikro)reaktorjev za pridobivanje in izkoriščanje vodika

S študijo na osnovi COMSOL Chemical Reaction Engineering Module, ki je optimiran za analizo transporta mase in drugih transportnih fenomenov, povezanih s kemijskimi reakcijami, smo testirali vmesnike za transport kemijskih snovi, ki vključujejo simulacijo kemijskih reakcij in transporta mase oziroma materiala z difuzijo, konvekcijo in migracijo nabitih spojin zaradi električnega polja. Študirali smo tudi vmesnike za simulacijo toka fluida in vmesnike za simulacijo toplotnega prenosa.

Na področju modeliranja mikro(reaktorjev) smo študirali termodinamiko in elektrokemijo gorivnih celic, transport naboja, transport mase in prenos toplote v gorivni celici. Pri termodinamiki smo preučevali in pripravljali programsko opremo za izračun entalpije, specifičnih toplot, entropije, proste energije kemijske reakcije, povratne in izhodne napetosti gorivne celice ter teoretične učinkovitosti gorivne celice. Pri elektrokemiji smo preučevali osnovne elektrokemijske koncepte, prenos naboja, aktivacijsko polarizacijo za reakcije prenosa naboja, kinetiko elektrod, izgube napetosti ter notranje in zunanje tokove v gorivnih celicah. Pri transportu naboja smo preučevali izgube napetosti zaradi transporta naboja, elektronsko prevodnost kovin in ionsko prevodnost polimernih elektrolitov. Pri transportu mase smo preučevali tokove goriva, oksidanta in proizvedene vode v gorivni celici. Pri prenosu toplote smo preučevali porazdelitev toplote v gorivni celici.

Izdelali smo aplikaciji nevronskih mrež za ocenjevanje virialnih koeficientov virialne enačbe ter za korelacijo in napovedovanje faktorjev stisljivosti plinskih zmesi.

Segment 3: študij fotokatalize in razvoj katalizatorjev za čiščenje vode in zraka

Študije na področju čiščenja zraka s fotokatalizo smo izvajali z uporabo doma izdelanega *in situ* plinskega fotoreaktorskega sistema, za katerega smo skonstruirali fotokatalitski celici za raziskave katalizatorjev v obliki prahov in tankih plasti na nosilnih ploščicah. Hlapno organsko snov, ki smo jo fotokatalitsko razgrajevali v toku zraka, je predstavljal toluen. Pri pripravi najbolj učinkovitih prahov smo sol-gel TiO_2 impregnirali v mezoporozno siliko, ki ima veliko specifično površino. Poleg tega preprečuje aglomeracijo TiO_2 nanodelcev v svojih porah. Tudi pri pripravi učinkovitih tankih plasti smo kombinirali titanov in silicijev oksid. Kompozitni katalizator s silikatnim vezivom je pokazal izboljšane mehanske in fotokatalitske lastnosti v primerjavi s čistim fotoaktivnim TiO_2 , kar se je odražalo na popolni razgradnji toluena v eni uri in enostavnosti ponovne uporabe katalizatorja.

V sodelovanju z Electrolux Italia s.p.a smo načrtali in izdelali prototip fotoreaktorja za

študije čiščenja odpadne vode iz gospodinjskih aparatov ter ga testirali z izbranimi imobiliziranimi katalizatorji na Al-ploščicah v vodnem mediju. Več vrst katalizatorjev smo pripravili na osnovi našega patentiranega postopka. Onesnažila, ki smo jih fotokatalizo v reaktorju odstranjevali, sta bili dve vrsti detergentov, eno tekstilno modro barvilo in bakterijska kultura (za določanje antibakterijske aktivnosti smo razvili nove, preciznejše metode). Za učinkovitejše čiščenje tekstilne odpadne vode smo se poslužili kombinacije rastlinske čistilne naprave in fotokatalize. Vzorci predčiščene in surove odpadne vode so bili izpostavljeni fotokatalitski oksidaciji in ozonaciji. Kombinacija obetih metod čiščenja je bila po pričakovanjih ugodna, saj se je s predčiščenjem v rastlinski čistilni napravi povečini skrajšal potreben čas obsevanja v pilotnem fotoreaktorju za doseganje dovoljenih mejnih vrednosti za izpust.

5.Ocena stopnje realizacije programa dela na raziskovalnem programu in zastavljenih raziskovalnih ciljev⁴

SLO

Cilji raziskovalnega programa so bili v celoti realizirani in v nekaterih segmentih še preseženi. To dokazuje, navkljub relativni majhnosti tega raziskovalnega programa, izredno veliko število znanstvenih publikacij (53). Kar 12 člankov je bilo objavljenih v revijah s faktorjem vpliva (IF) nad 5 od tega kar 3 članki v revijah z IF>10, najvišji celo v reviji z IF=18,2. Člani skupine so bili 12-krat vabljeni predavatelji na mednarodnih konferencah. Zelo intenzivno mednarodno sodelovane je posledica dobrih znanstvenih rezultatov in renomeja skupin vključenih v program. Delno je posledica tega raziskovalnega programa tudi pridobitev 7FP RegPot projekta, podeljenega kot izkaz za dosedanjo odličnost raziskovalnih skupin. Skupine tudi zelo intenzivirajo sodelovanje z industrijo. Po vsebini so bili realizirani naslednji cilji:

Segment 1:

Kot je bilo predvideno smo raziskali vrsto novih materialov ter pristopov k uravnavanju optoelektronskih lastnosti. Tako smo ugotovili in dokazali, da lahko izboljšamo fotokatalitsko aktivnost z uporabo zunanjega električnega polja, v sistemih z Fe_2O_3 z dopiranjem z Al_2O_3 in Cr_2O_3 , v piroklornih sistemih z vključitvijo čim večje množine Fe^{3+} ionov, sistemu ZnS/ZnO z delno konverzijo faz in nanostrukturiranjem sistema itd. Še posebej bi izpostavili piroklor iz sistema $\text{Bi}_2\text{O}_3\text{-Fe}_2\text{O}_3\text{-TeO}_2$, ki smo ga odkrili mi in kaže do sedaj najbolj perspektivne fotokatalitske lastnosti v sorodnih sistemih.

Segment 2

V skladu z načrti smo razvili principe in model reaktorja za fotokatalitsko cepitev vode in konverzijo vodika. Osvojili smo teorijo termodinamike in elektrokemije gorivne celice ter transporta naboja, mase in toplotne v celici. Osvojili smo simuliranje različnih tipov reaktorjev, heterogene katalize, homogene katalize in homogenih reakcij, mešanja, masnega transporta (npr. difuzija skozi gorivno celico), optimizacije katalitičnega mikroreaktorja, separacijskih procesov ter površinskih reakcij in deponirnih procesov. S COMSOL Batterie and Fuel Cell module smo testirali dva tipa gorivnih celic in sicer *Proton exchange membrane fuel cell (PEMFC)* in *Solid oxide fuel cell (SOFC)*.**Segment 3**

Pripravili smo nove učinkovite fotokatalizatorje za čiščenje vode (prijavljen patent) in zraka. Z raziskav praškastih fotokatalizatorjev v plinskem fotoreaktorskem sistemu, ki je bil razvit v okviru programa, smo prešli tudi na raziskave imobiliziranih fotokatalizatorjev v obliki tankih plasti na nosilnih ploščicah, kar ima višjo aplikativno vrednost. Na področju čiščenja vode s fotokatalizo smo uporabili več reaktorjev, ki omogočajo

kombinacijo z drugimi metodami čiščenja, in izdelali pilotni fotoreaktor. Posvetili smo se tudi sintezi tankih prozornih plasti fotokatalizatorja za doseganje samočistilne in protizarositvene funkcije na steklenih površinah. Poleg novih materialov smo razvili tudi nekaj novih metodologij za določanje fotokatalitske in antimikrobne učinkovitosti prevlek.

6.Utemeljitev morebitnih sprememb programa raziskovalnega programa oziroma sprememb, povečanja ali zmanjšanja sestave programske skupine⁵

Ni bilo sprememb v vsebini raziskovalnega programa.

Sestava programske skupine se je nekoliko spremenila zaradi odhoda treh sodelavcev (Urh Černigoj, Urše Pirnat in Ksenija Maver) z UNG v drugo organizacijo. Namesto teh dveh smo predlagali nove člane programske skupine: Martina Bergant Marušič Sandro Gardonio, Marko Kete in mlada raziskovalca Urška Žvab in Andraža Šuligoja. Zaradi bolj učinkovitega dela smo združili ure sodelavk na FKKT na UNI-Mb tako, da smo iz programske skupine izločili Mašo Islamčević in njene ure dodelili Severini Oreški.

7.Najpomembnejši znanstveni rezultati programske skupine⁶

Znanstveni dosežek				
1.	COBISS ID		1894907	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Novi (Bi1.88 Fe0.12)(Fe1.42 Te0.58) O6.87 piroklor s prehodom v spinsko steklo	
		ANG	New (Bi [sub] 1.88 Fe [sub] 0.12)(Fe [sub] 1.42 Te [sub] 0.58) O [sub] 6.87 pyrochlore with spin-glass transition	
	Opis	SLO	Poročali smo o odkritju nove piroklorne spojine (Bi1.88Fe0.12) (Fe1.42Te0.58)O6.87, ki se odlikuje po zelo perspektivnih fotokatalitskih lastnostih saj vseh do sedaj znanih piroklorov, vsebuje največ železa. Z rentgensko in neutronsko difrakcijsko analizo, smo določili kristalografske značilnosti. Pri 20K ta piroklor razvije močno spinsko sklopitev, in kaže karakteristike spinskega stekla. Ravno pri tej temperaturi smo zaznali tudi vpliv magnetne sklopitve na dielektrične lastnosti kar potrjuje, da smo odkrili material z magnetoelektrično sklopitvijo. Širina prepovedanega pasu je nižja of 2eV, kar je najnižje med piroklori in kaže na velik potencial te spojine za fotokatalizerske aplikacije v vidnem delu spektra.	
		ANG	We reported on discovery of a new pyrochlore compound, (Bi1.88Fe0.12) (Fe1.42Te0.58)O6.87, which is characterized by the highest Fe content and the most promising photocatalytic properties among all known pyrochlores. Using x-ray and neutron diffraction we determined its crystallographic properties. At 20K the pyrochlore developed strong spin coupling into the spin glass state. At this temperature the influence of the magnetic coupling on dielectric properties was shown, which confirms the magnetoelectric coupling. the band gap was determined to be lower than 2eV, which shows on a great potential of this compound for photocatalytic applications.	
	Objavljeno v		The Society; Chemistry of materials; 2011; Vol. 23, no. 10; str. 2619-2625; Impact Factor: 7.286; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.27; A": 1; A': 1; WoS: EI, PM; Avtorji / Authors: Babu Gunda Santosh, Valant Matjaž, Page Katharine, Llobet Anna, Kolodiazhnyi Taras, Axelsson Anna-Karin	
	Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek	

2.	COBISS ID		2210043	Vir: COBISS.SI	
	Naslov	SLO	Elektrokalorični materiali za prihodnje tehnologije ohlajevanja	ANG	Electrocaloric materials for future solid-state refrigeration technologies
	Opis	SLO	Pomemben prispevek k ohranjevanju okolja predstavlja razvoj novih energetsko učinkovitejših tehnologij. Trenutni intenziven razvoj na področju elektrokaloričnih (EC) materialov temelji na iskanju novi, energetsko učinkovitih in okolu prijaznih, tehnologij ohlajevanja. Ozko grlo pri tem razvoju so nezadostni EC materiali, ki še vedno ne dosegajo zahtevanih EC temperaturnih sprememb, ki jih je možno inducirati z električnim poljem. nadaljen razvoj je usmerjen na različne segmente s poudarkom na razvoju teoretičnega razumevanja, izboljšanih EC materialov in inteligentnega oblikovanja materialov. Ta članek podrobno povzema in kritično razpravlja o napredku, ki je bil do sedaj narejen na tem področju. Ponudi celovito sliko stanja iz katere izlošči nova znanja in predlaga prihodnje raziskovalne usmeritve. Povabilo k objavi v eni od najodmevnnejših revij na področju materialov je posebno priznanje avtorju članka in kaže na njegov ugled na tem znanstvenem področju	ANG	An important contribution to environmental sustainability is represented by development of energy efficient technologies. The current intensive research in electrocaloric (EC) materials has been driven by the quest for new energy efficient and environmentally friendly cooling technologies that would contribute to a reduced carbon footprint. The bottle neck for development of the EC cooling technologies is in the yet still too small EC temperature changes that can be induced in the materials. To overcome this, the research has focused on several segments with an emphasis on development of theoretical understanding, high performance EC materials and smart material engineering. This paper insightfully reviews the progress in these research fields and critically discusses the major advances in order to present a compact picture of the state-of-the-art, extract new knowledge and propose promising future research directions. The invitation to contribute to one of the most prestigious journals in the field of Materials us a great honor for the authors and shows on his scientific reputation in the field
	Objavljeno v		Pergamon Press; Progress in Materials Science; 2012; Vol. 57, no. 6; str. 980-1009; Impact Factor: 18.216; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.27; A": 1; A': 1; WoS: PM; Avtorji / Authors: Valant Matjaž		
	Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek		
3.	COBISS ID		1422587	Vir: COBISS.SI	
	Naslov	SLO	Vpliv raztopljenega ozona ali železovih(III) ionov na fotorazgradnjo tiakloprida v prisotnosti različnih TiO ₂ katalizatorjev	ANG	Effect of dissolved ozone or ferric ions on photodegradation of thiacloprid in presence of different TiO ₂ [sub]2 catalysts
	Opis	SLO	Kombinacija TiO ₂ fotokatalize z anorganskimi oksidanti (kot sta O ₃ in H ₂ O ₂) ali ioni prehodnih kovin pogosto vodi do sinergije. V tem članku smo poročali o rezultatih preučevanja razpada tiakloprida, modernega neonikotinoidnega insekticida, tokrat z uporabo različnih naprednih oksidacijskih metod in TiO ₂ fotokatalizatorjev. Z eksperimenti fotokatalitske ozonacije smo kvantificirali sinergijski učinek na modelu treh različnih TiO ₂ fotokatalizatorjev. V nasprotju z ozonacijo pa nismo opazili nobene sinergije pri fotokatalitski razgradnji tiakloprida v prisotnosti raztopljenih Fe(III) ionov.		Combining TiO ₂ photocatalysis with inorganic oxidants (such as O ₃ and H ₂ O ₂) or transition metal ions often leads to a synergy. In this work we

		<i>ANG</i>	studied the disappearance of thiacloprid, a modern neonicotinoid insecticide, applying various advanced oxidation processes and TiO ₂ photocatalysts. In photocatalytic ozonation experiments, synergic effect of three different TiO ₂ photocatalysts was quantified. On the contrary, no synergy was observed in photocatalytic degradation of thiacloprid in the presence of dissolved iron(III) species.
	Objavljeno v		Elsevier Scientific Publ. Co.; Journal of hazardous materials; 2010; Vol. 177, Iss. 1/3; str. 399-406; Impact Factor: 3.723; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 0.88; A": 1; A': 1; WoS: IH, IM, JA; Avtorji / Authors: Černigoj Urh, Lavrenčič Štangar Urška, Jirkovský Jaromír
	Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek
4.	COBISS ID		2265083 Vir: COBISS.SI
	Naslov	<i>SLO</i>	Izvor magnetizma v Mn-dopiranemu SrTiO ₃
		<i>ANG</i>	The origin of magnetism in Mn-doped SrTiO ₃ [sub] 3
	Opis	<i>SLO</i>	SrTiO ₃ velja za enega od najbolj zanimivih, vendar za fotokatalitske namene še ne dovolj raziskanih, polprevodnih materialov. Mi smo posebno pozornost namenili vplivu dopiranja na fotokatalitske lastnosti, pri čemer smo natančno raziskovali mehanizem vgrajevanja dopantov med njimi tudi Mn. Posledično smo prišlo do presentljivih spoznanj o vplivu procesnih parametrov na te atomistične mehanizme vgrajevanja ter o odsotnosti magnetizacije v primeru idealnega vgrajevanja dopanta. To zavrača dosedaj znane teorije o lokalnih poljih v tem materialu zaradi česa je to naše delo bilo deležno velikega odmeva in sprejeto v objavo v tak zelo odmevni reviji kot je Advanced Functional Materials
		<i>ANG</i>	SrTiO ₃ is considered to be one of the most interesting, but for photocatalytic applications not enough investigated, semiconductive materials. We have paid special attention to the influence of doping on the photocatalytic activity. Within this study we have investigated in details the incorporation mechanisms of dopants; among them Mn. The study resulted in some surprising results on influence of the processing parameters on the atomistic mechanisms of the incorporation and the absence of magnetization in the case of an ideal dopant incorporation. This contradicts and disproves current theories on local fields in this material and, therefore, our work has attracted huge interest and was published in such respected journal as Advanced Functional Materials is.
	Objavljeno v		Wiley Interscience; Advanced functional materials; 2012; Vol. 22, no. 10; str. 2114-2122; Impact Factor: 10.179; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.27; A": 1; A': 1; WoS: DY, EI, NS, PM, UB, UK; Avtorji / Authors: Valant Matjaž, Kolodiazhnyi Taras, Arčon Iztok, Aguesse Frederic, Axelsson Anna-Karin, Alford Neil McN.
	Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek
5.	COBISS ID		1382651 Vir: COBISS.SI
	Naslov	<i>SLO</i>	Molekularno auksetično obnašanje epitaksialnega tankega filma Co-ferita
		<i>ANG</i>	Molecular auxetic behavior of epitaxial co-ferrite spinel thin film
	Opis	<i>SLO</i>	Hematit in feriti postajajo vse bolj zanimivi fotokatalizatorji za imobilizirane sisteme za cepitev vode, kjer so kot filmi integrirani v elektrofotokatalitske celice. Pri naših raziskavah smo študirali imobilizacijo Co-ferita in strukturne značilnosti takšnih filmov in odkrili auksetične lastnosti. V funkcionalnih oksidnih materialih je tako imenovano auksetično obnašanje ekstremno redko. Dimenzijske osnovne celice epitaksialnega tankega filma CoFe ₂ O ₄ , ki je podvržen kompresijski aksialni napetosti, se skrčijo v vseh smereh, tudi transverzalni, s Poissonovim razmerjem -0.85. V spinelni strukturi smo identificirali gibljivo rešetko z mehanizmom zapiranja, ki omogoča negativno Poissonovo razmerje. Opažen pojav pomebno vpliva na

		funkcionalne lastnosti CoFe2O4 in omogoča konstrukcijo novih tipov nanostruktur in nano-naprav. To odkritje je sprožilo širše zanimanje javnosti saj je vpliv auxetičnih lastnosti na aplikacije teh filmov še nejasen. Raziskave se usmerjajo v študij vpliva zunanje napetosti na optoelektroniske lastnosti in s tem na fotokatalitsko aktivnost. Zaradi pomembnosti odkritja smo uspeli članek objaviti v eni najboljših revij na področju materialov Advanced Functional Materials.
	ANG	Hematites and ferrites are becoming increasingly interesting photocatalysts for immobilized systems for water splitting, where in the form of films are integrated in electrophotocatalytical cells. We have studied immobilization of co-ferrite and structural characteristics of such films. During these studies we discovered auxetic properties. In functional oxide materials the so called molecular auxetic behavior is extremely rare. The CoFe2O4 epitaxial thin film under compressive axial strain reduces its cell dimensions also in the transverse direction with a Poisson's ratio of -0.85. We identified the hinge-like honeycomb network in the spinel structure that is responsible for the negative Poisson's ratio. The observed phenomenon importantly affects functional properties of CoFe2O4 and enables a construction of a new class of nanostructures and nano-devices. This discovery has triggered interest of broad scientific community because the influence of the auxetic properties on application of the films is not yet understood. The research is now directed into studies of the influence of external stress on optoelectronic properties and, consequently, the photocatalytic activity. Because of the importance of the discovery we managed to publish this paper in one of the best journals in the field of Material Science, i.e. Advanced Functional Materials.
Objavljeno v		Wiley Interscience; Advanced functional materials; 2010; Vol. 20, no. 4; str. 644-647; Impact Factor: 8.486; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.13; A ¹ : 1; A ² : 1; WoS: DY, EI, NS, PM, UB, UK; Avtorji / Authors: Valant Matjaž, Axelsson Anna-Karin, Aguesse Frederic, Alford Neil McN
Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek

8.Najpomembnejši družbeno-ekonomski rezultati programske skupine⁷

Družbeno-ekonomski dosežek			
1.	COBISS ID	935419	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Priprava TiO ₂ [spodaj]2/SiO ₂ [spodaj]2 solov in njihova uporaba za nanos samočistilnih in protizarositvenih prevlek
		ANG	Preparation of TiO ₂ /SiO ₂ sols and their application for deposition of self-cleaning and antifogging coatings
	Opis	SLO	Patent opisuje nov izdelek, ki temelji na TiO ₂ -SiO ₂ vodnem solu z dodatki organskih topil za doseganje visoke optične kvalitete prevlek, ki se utrdijo že pri sobni temperaturi in naravni izpostavitvi soncu. Prevleke vsebujejo fotoaktivne kristalinične delce anatasa nanometrskih dimenzij, silika služi za doseganje boljše hidrofilnosti in mehanskih lastnosti prevlek. Nadaljujemo z aktivnostmi za razširitev patenta v evropski prostor.
		ANG	The patent describes a new product, based on TiO ₂ -SiO ₂ aqueous sol with addition of some organic solvents to assure high optical quality and homogeneity of the coatings, which strengthen already at room temperature and upon sun exposure. The coatings are composed of photoactive crystalline anatase nanoparticles, while silica serves to attain better hydrophilicity and mechanical properties of the coatings. Now we continue with activities to widen the patent protection in European

		countries.
Šifra	F.33	Patent v Sloveniji
Objavljeno v		Urad RS za intelektualno lastnino; 2009; 1 f.; Avtorji / Authors: Černigoj Urh, Lavrenčič Štangar Urška
Tipologija	2.24	Patent
2.	COBISS ID	Vir: vpis v poročilo
	Naslov	Izkazana pedagoška dejavnost članov programske skupine
	ANG	Pedagogic activity of the program group members
	Opis	<p>Člani programske skupine so nosilci in predavatelji naslednjih predmetov na Univerzi v Novi Gorici:</p> <ul style="list-style-type: none"> - M. Valant: Sodobni materiali (6 ECTS), Individualni projekti (18 ECTS), (tudi dekan Fakultete za znanosti o okolju) - U. Lavrenčič Štangar: Kemija (10 ECTS), Okolju prijazne tehnologije (6 ECTS), Aktualne teme v okolju (6 ECTS) - S. Gardonio: Nanostrukturirani materiali (3 ECRS) - S. Oreški: Numerične metode v kemiji in kemijski tehniki (15 ECTS) in Metode umetne inteligence v kemiji in kemijski tehniki (15 ECTS) <p>Prof. Lavrenčič Štangar je ob tem tudi gostujoči profesor na Univerzi v Padovi (Scuola di dottorato in scienze molecolari), kjer predava predmet "Procesi in materiali za izrabo trajnostne energije". Prof. Valant je gostujoči akademik na Imperial College London, kjer je bil mentor dvema doktorandoma.</p>
		<p>The program group members are the principals and lectures at the following courses at University of Nova Gorica:</p> <ul style="list-style-type: none"> - M. Valant: Advanced Materials (6 ECTS), Individual projects (18 ECTS), (also the Dean of School for Environmental Sciences) - U. Lavrenčič Štangar: Chemistry (10 ECTS), Environment Friendly Technologies (6 ECTS), Topical Subjects in Environment (6 ECTS) - S. Gardonio: Nanostructured Materials (3 ECTS) - S. Oreški: Numerical methods in chemistry and chemical technique (15 ECTS) and Methods of artificial intelligence (15 ECTS) <p>In addition, Prof. Lavrenčič Štangar is a visiting professor at University of Padova (Scuola di dottorato in scienze molecolari) where she gives the course of Processes and Materials for the Exploitation of Sustainable Energy.</p> <p>Prof. Valant is visiting academic at imperial College London, where he was a supervisor of two PhD students.</p>
	Šifra	D.10 Pedagoško delo
	Objavljeno v	N/A
	Tipologija	3.14 Predavanje na tuji univerzi
3.	COBISS ID	2104827 Vir: vpis v poročilo
	Naslov	Razvoj visokoprevodnega toplotnega izmenjevalca za uporabo v plitvih vrtinah
	ANG	Development of highly conductive heat exchanger for shallow boreholes
	Opis	<p>S slovenskim podjetjem Corus Inženirji d.o.o. smo uspešno zaključili razvoj novega produkta s področja izrabe obnovljivih virov energije. Razvili smo visoko termično prevodno geosondo za učinkovito izrabo geotermalne energije, ki se sedaj komercialno trži. Naloga članov programske skupine je bila razvoj visokoprevodnega betona in razvoj računalniškega modela za simulacijo toplotnih tokov v vrtini. Učinkovitost razvoja so potrdile tudi študije toplotnega prenosa na objektu.</p> <p>Na osnovi tega razvoja je bilo ustanovljeno podjetje za trženje tega</p>

		produkta, ki posluje z 40.000EUR dodane vrednosti na zaposlenega.
	ANG	With a Slovenian company Corus Inženirji d.o.o. we have successfully finished development of a new product from the field of renewable energy sources. Together we have developed a high thermal conductive heat exchanger for an efficient exploitation of geothermal energy, which is already commercialized. The task of the program group members were development of high thermal conductive concrete/grout and development of computer model for simulation of heat flow in the borehole. The efficiency of the development has been confirmed by the studies of heat transport on the construction site. Based on the development the new company was established, which achieves 40.000 EUR of added value per employee.
	Šifra	F.06 Razvoj novega izdelka
	Objavljeno v	Univerza; 2011; 26 f.; Avtorji / Authors: Zdovc Miro, Valant Matjaž
	Tipologija	2.13 Elaborat, predštudija, študija
4.	COBISS ID	1768955 Vir: COBISS.SI
	Naslov	<p>SLO Raziskave sodobnih fotokatalitskih tehnologij za obdelavo vode s posebnim poudarkom na sistemih za izkoriščanje vidne svetlobe v primerjavi s konvencionalnimi UV sistemi</p> <p>ANG Examination of the state of the art of photocatalysis-based technologies for water treatment, with particular focus on visible light responsive systems in comparison with more conventional UV light responsive systems</p>
	Opis	<p>SLO Za podjetje Electrolux Italia s.p.a smo izdelali obsežno študijo z naslovom »Pregled stanja na področju fotokatalitskih tehnologij za čiščenje vode s poudarkom na sistemih, ki se odzivajo na vidno svetlobo, v primerjavi z bolj konvencionalnimi sistemi, ki se odzivajo na UV svetlobo«, ki vsebuje 135 strani. Namen študije je ugotoviti industrijsko uporabnost fotokatalitskih tehnologij za čiščenje vod in eventualna implementacija teh tehnologij za potrebe omenjenega multinacionalnega podjetja. Sodelovanje z Electroluxom se je na podlagi te študije nato nadaljevalo v laboratoriju z načrtovanjem in izdelavo prototipa fotoreaktorja s predpisanimi dimenzijsami za uporabo v gospodinjskih aparatih, ki smo ga testirali z izbranimi imobiliziranimi katalizatorji na Al-ploščicah v vodnem mediju.</p> <p>ANG For the company Electrolux Italia s.p.a we have made a comprehensive study (135 pages) with the title given above. The aim of this study was to find out industrial applicability of photocatalytic technologies for water treatment and eventual implementation of these technologies for the needs of Electrolux multinational corporation. On the basis of this study, cooperation with Electrolux was then continued in the laboratory with a design and construction of prototype photoreactor with prescribed dimensions for the use in Electrolux appliances. The reactor was tested with selected immobilized catalysts on Al-plates in aqueous media.</p>
	Šifra	F.09 Razvoj novega tehnološkega procesa oz. tehnologije
	Objavljeno v	Univerza; 2011; 1 zv. (loč. pag.); Avtorji / Authors: Lavrenčič Štangar Urška, Tasbihi Minoo, Kete Marko
	Tipologija	2.13 Elaborat, predštudija, študija
5.	COBISS ID	255772416 Vir: COBISS.SI
	Naslov	<p>SLO Organizacija konference z naslovom Slovenian-Italian Conference on Materials and Technologies for Sustainable Growth, Ajdovščina, 4-6 maj, 2011</p> <p>ANG Conference Organized - title of conference "Slovenian-Italian Conference on Materials and Technologies for Sustainable Growth, Ajdovščina, Slovenia, 4-6 maj, 2011</p>

Opis	SLO	Na pobudo in v organizaciji članov te programske konference je bila izvedena Slovensko-Italijanska konferenca o materialih in tehnologijah za trajnostni razvoj, ki je zbrala nosilce teh pomembnih razvojnih trendov kot so znanstveno-raziskovalni in razvojni delavci ter industrijski partnerji, Konferenca se je odvijala okoli dveh osrednjih problematik nadaljnjega razvoja družbe. To sta trajnostni razvoj materialov in tehnologij za ohranjanje okolja, in učinkovito rabo energije.
	ANG	On initiative and under organization of the members of this research program the Slovenian-Italian Conference on Materials and Technologies for Sustainable Growth has attracted important players on several technological sectors, with a wide attendance of scientists, R&D researchers and industrial people. the conference covered two main topics of future development of the society. These are sustainable development of materials and technologies for preservation of the environment and efficient use of energy resources.
Šifra		B.01 Organizator znanstvenega srečanja
Objavljeno v		University; 2011; 1 optični disk (CD-ROM); Avtorji / Authors: Valant Matjaž, Gardonio Sandra, Fabbretti Elsa, Pirnat Urša
Tipologija	2.30	Zbornik strokovnih ali nerecenziranih znanstvenih prispevkov na konferenci

9.Druži pomembni rezultati programske skupine⁸

- Ustanovitev Laboratorijsa za raziskave materialov na Univerzi v Novi Gorici
Na iniciativo in pod vodstvom prof. Valanta smo na Univerzi v Novi Gorici akreditirali novi laboratorij z imenom Laboratorijs za raziskave materialov. Laboratorijs bo izvajal raziskave povezane z materiali in tehnologijami za trajnostni razvoj, okoljskimi materiali in materiali za alternativne vire energije. Akreditacijska številka laboratorijsa je 1540-011
- prof. Valant je bil izbran za slovenskega predstavnika za univerzitetne raziskave povezane z energijo v okviru Evropske univerzitetne zveze (EAU)
- prof. Valant je leta 2012 prejel Zoisovo nagrado za vrhunske raziskovalne dosežke

10.Pomen raziskovalnih rezultatov programske skupine⁹

10.1.Pomen za razvoj znanosti¹⁰

SLO	Vpliv raziskav v okviru tega programa na znanost in ostale raziskovalce na tem področju je velik. Po pričakovanjih raziskave znotraj tega programa generirajo nove pomembne znanstvene izsledke kot npr.: <ul style="list-style-type: none"> - razvoj novih tipov materialov in njihova uporaba v fotokatalitskih procesih - analiza strukturnih, elektronskih in fotokatalitičnih karakteristik novih katalizatorjev - sinteza nano-delcev s kontrolirano morfologijo - razumevanje vplivov morfologije, sestave, polimornih karakteristik in velikosti delcev na fotokatalitsko aktivnost - razumevanje fotokatalitskih procesov na površini katalizatorja - razvoj mikro-reaktorja za konverzijo vodika Projekt bo usmerjen v končen cilj, ki je razvoj foto-katalizatorja in fotokatalitnega procesa s karakteristikami, ki bodo bistveno boljše od obstoječih. To bi seveda imelo velik tehnološki pomen, vendar pa bi tudi predstavljalo pomemben znanstveni dosežek Zelo aktivno nameravamo komunicirati z raziskovalnimi laboratorijsi, ki so že vključeni v tovrstne raziskave. To nam bo omogočilo ustrezno izmenjavo idej in strokovnosti na področju fotokatalize. Omogočilo nam bo dosegati sinergijske efekte z ostali relevantnimi skupinami
-----	--

širom sveta. Člani programske skupine so se tudi obvezali, da bodo izsledke svojih raziskav sproti objavljeni (ozziroma patentirati) v znanstvenih revijah z visokim indeksom vpliva ter s tem izkazali kvaliteto opravljenih raziskav znotraj predlaganega programa

ANG

The impact of the proposed research on the science and scientific community is high. The new important scientific results are expected from:

- development of new types of materials and their application in photocatalytic process
- studies of the structural, electronic and photocatalytic characteristics of new catalysts
- synthesis of nano-powders with controlled morphology
- understanding an influence of morphology, composition, polymorph characteristic and particle size on photocatalytic activity
- understanding of the photo-catalytic processes on the surface of the catalyst
- development of the microreactor design for hydrogen conversion

Finally, we believe that we can produce the photocatalysts and the photocatalytic process with characteristics that are superior to today's systems. This would be technologically very important but would also represent an important scientific achievement.

An active scientific communication is foreseen to be established, which will give basis for a proper idea and expertise exchange on the field of photocatalysis. This will bring into the proposed new programme a synergy with other groups around the world, which are intensively involved in this topic.

The programme partners have committed themselves to timely publish the results in high-ranking scientific journals and, so, disseminate the produced results and demonstrate the quality of the research.

10.2.Pomen za razvoj Slovenije¹¹

SLO

Zaradi okoljevarstvenih in energetskih problemov, s katerimi se dnevno srečujemo na našem planetu, je za nadaljen trajnostni razvoj nujno omogočiti izrabo "čistih" oblik energije, ki ne bodo obremenjevale okolja. Torej ne bodo onesnaževale zraka, voda ali prispevale k globalnemu segravanju. Zaradi tega dejstava in pa zaradi zelo nestabilne cene nafte, povezane z veliko energetsko odvisnostjo od nekaj največjih naftnih proizvajalk, se je veliko držav strateško usmerilo v razvoj in izrabo alternativnih virov energije. Izredno obetavno področje je izkoriščanje vodika kot energenta prihodnosti. Za Slovenijo to pomeni, da bi lahko razvila tehnologijo proizvodnje lastnega energenta in tako v prihodnosti postala energetsko neodvisna oziroma celo izvoznik tega energenta. Ob očitnih ekonomskih prednostih se na takšno tehnologijo navezuje cela vrsta stranskih pozitivnih vplivov, ki posegajo v področje izboljšanja življenskega standarda, vzgoje visoko naravoslovno in tehnično izobraženih kadrov ter krepitve nacionalne identitete preko tehnološke promocije države. Razvoj vodikovih tehnologij je še v zgodnji fazi in države, ki bodo uspele slediti in prispevati k tem razvoju, bodo lahko v prihodnje vodilni akterji na področju novih emergentov. Strateška usmeritev v to področje nam tako lahko v prihodnosti zagotovi izreden družbeno-ekonomski razvoj in na njegovi osnovi tudi razvoj ostalih družbenih sfer (sociala, izobraževanje, kultura...).

ANG

Because of the environmental and energetic problems, which we are facing on a daily basis, use of »clean« energy sources that would have no impact on our environment is crucially important for a further sustainable development. The new clean energy sources should not pollute air and water or contribute to global warming. This fact combined with a highly volatile price of oil and uncomfortable energetic dependence on small number of oil producers induced a strategic orientation in a development and use of alternative energy sources in many countries. One of these alternative energy sources is hydrogen. Slovenia could develop a technology for a production of its own energy source – hydrogen – and in the future appear as energetically independent or even hydrogen exporter. In addition to obvious economic impact an application of the hydrogen technology induces many positive side effects that range from increased living standard, increased interest in natural and technical sciences and strengthening of national identity through technological promotion of the country. The development of the hydrogen technologies is still in an early stage and the countries that will follow or even contribute to this development will have an important comparative advantage and become the main players in the field of new energy sources. Strategic orientation in this field could assure a significant

socio-economic development and, consequently, a development in other segments such as social care, education, culture...

**11.Zaključena mentorstva članov programske skupine pri vzgoji kadrov v obdobju
1.1.2009-31.12.2012¹²**

11.1. Diplome¹³

vrsta usposabljanja	število diplom
bolonjski program - I. stopnja	2
bolonjski program - II. stopnja	1
univerzitetni (stari) program	3

11.2. Magisterij znanosti in doktorat znanosti¹⁴

Šifra raziskovalca	Ime in priimek	Mag.	Dr.	MR	
30930	Chandramathy S. Pravee	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	
29563	Minoo Tasbihi	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input type="checkbox"/>	
27750	Dunja Mahne	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input type="checkbox"/>	

Legenda:

- Mag.** - Znanstveni magisterij
- Dr.** - Doktorat znanosti
- MR** - mladi raziskovalec

12.Pretok mladih raziskovalcev – zaposlitev po zaključenem usposabljanju¹⁵

Šifra raziskovalca	Ime in priimek	Mag.	Dr.	Zaposlitev	
30930	Chandramathy S. Pravee	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	A - raziskovalni zavodi	
29563	Minoo Tasbihi	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	A - raziskovalni zavodi	
27750	Dunja Mahne	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	D - Javni zavod	

Legenda zaposlitev:

- A** - visokošolski in javni raziskovalni zavodi
- B** - gospodarstvo
- C** - javna uprava
- D** - družbene dejavnosti
- E** - tujina
- F** - drugo

13.Vključenost raziskovalcev iz podjetij in gostovanje raziskovalcev, podoktorandov ter študentov iz tujine, daljše od enega meseca, v obdobju 1.1.2009-31.12.2012

Šifra raziskovalca	Ime in priimek	Sodelovanje v programske skupini	Število mesecev	
0	Cristina Jinga	C - študent – doktorand	3	
32349	Santosh Babu Gunda	D - podoktorand iz tujine	11	
34288	Michael Walker Pitcher	A -	12	

33505	Sumesh George	D - podoktorand iz tujine	3	
0	Giulia Beltrame	C - študent – doktorand	2	
0	Alina Darjan	C - študent – doktorand	3	

Legenda sodelovanja v programske skupini:

- A - raziskovalec/strokovnjak iz podjetja
- B - uveljavljeni raziskovalec iz tujine
- C - študent – doktorand iz tujine
- D - podoktorand iz tujine

14. Vključevanje v raziskovalne programe Evropske unije in v druge mednarodne raziskovalne in razvojne programe ter drugo mednarodno sodelovanje v obdobju 1.1.2009-31.12.2012¹⁶

SLO

- 7FP projekt RegPot-CT-2011-28606 Strengthening University of Nova Gorica Research Potential in Environmental Sciences and Novel Nanomaterials, Koordinator: Matjaž Valant
- ERDF projekt- NANOFORCE - Nanotechnology for Chemical Enterprises – how to link scientific knowledge to the business in the Central Europe, (2011-2013); Nosilec na UNG: Urška Lavrenčič Štangar
- HPC-Europa2 v sodelovanju z Evropsko komisijo (Capacities Area - Research infrastructures), Barcelona Supercomputing Centre in CSIC, Granada Španija, Vodja projekta: CS. Praveen
- Program čezmejnega sodelovanja Slovenija-Italija: ASTIS - Podzemne vode čezmejnih vodonosnikov Isonzo/Soča, (2011-2014), U. Lavrenčič Štangar
- COST projekt Photocatalytic Technologies and Novel Nanosurfaces Materials – Critical Issues, COST 540, EU, (2006-2010); slovenski predstavnik v upravnem odboru: prof. dr. Urška Lavrenčič Štangar
- BI-USA/09-12-002 Novi nano-fotokatalizatorji za proizvodnjo vodika s sončno svetlobo (2009-2012), Lawrence Berkeley National Laboratory, ZDA, vodja projekta: Matjaž Valant,
- BI-IN/10-12-011 Proizvodnja vodika s sončno svetlobo z uporabo Fe-TiO₂ in TiO₂ tankih filmov in prahov, Centre for Materials for Electronics Technology, Ministry of Communications and Information Technology, Government of India, vodja projekta: Urša Pirnat,
- BI-IN/10-12-002 Sinteza, karakterizacija in lastnosti nanostrukturiranega kompozita multiferoik-kovina-polimer, Indian Nationa Institute for Interdisciplinary Science & Technology, vodja projekta: Matjaž Valant,
- BI-IT/11-13-012, Organsko-anorganski hibridni materiali s polioksometalati za okoljske aplikacije, (2011-2013), CNR-ISTM, University of Padova, Italija, vodja projekta: prof. dr Urška Lavrenčič Štangar
- BI-CZ/11-12-009; Tiskane plasti titanovega dioksida in njihova fotokatalitska aktivnost, Institute of Chemical Technology, Praga, Češka, vodja projekta: prof. dr. Urška Lavrenčič Štangar
- BI-CZ-08-09-010; Fotoinducirane lastnosti večkomponentnih in večplastnih TiO₂/SiO₂ prevlek, (2008 - 2009); Institute of Chemical Technology, Department of Inorganic Technology, Prague, Češka, vodja projekta: prof. dr. Urška Lavrenčič Štangar
- BI-RO/12-13-004; Kovinsko oksidne nanostrukture za obdelavo vode; Politehnic University of Bucharest, Romunija, vodja projekta: Matjaž Valant

15. Vključenost v projekte za uporabnike, ki v so obdobju trajanja raziskovalnega programa (1. 1. 2009 – 31. 12. 2012), potekali izven financiranja ARRS¹⁷

SLO

- industrijski projekt-podjetniški sklad; Razvoj izolacijskega materiala iz recikliranih tekstilij, Ekologikmont d.o.o., vodja projekta: Matjaž Valant
- industrijski projekt (v okviru Valor TIA): Razvoj visoko prevodnega toplotnega izmenjavalca za uporabo v plitvih vrtinah, Corus Inženirji d.o.o. Družba za inženiring, projektiranje in tehnično svetovanje, vodja projekta: Matjaž Valant
- industrijski projekt: SiC coatings from preceramic precursor, EIM Capital Partners, San Francisco, ZDA, vodja projekta: Matjaž Valant
- Industrijski projekt: "Research and development in the field of photocatalysis and water purification" za Electrolux Italia SpA; 2010-2012, vodja projekta: prof. dr. Urška Lavrenčič Štangar
- Industrijski projekt: »Razvoj tankih plasti za preprečevanje adhezije ledu na površino letalskih kril in krakov vetrnih elektrarn« za Pipistrel d.o.o.; 2009-2011, Urška Lavrenčič Štangar
- naročilo v okviru TIA projekta: »Študija uporabe nanoprevlek v živilski industriji« in »Študija aplikacije nanoprevlek na boben« za Škrlj kovinska oprema d.o.o.; 2010-2011, Urška Lavrenčič Štangar

16. Ocena tehnološke zrelosti rezultatov programa in možnosti za njihovo implementacijo v praksi (točka ni namenjena raziskovalnim programom s področij humanističnih ved)¹⁸

SLO

Čiščenje vode: rezultati raziskav se približujejo implementaciji v praksi – rezultat je sklenitev že treh pogodb z Electrolux Italia s.p.a. za implementacijo fotokatalitskih tehnologij v čiščenju odpadnih vod iz gospodinjskih aparatov.

Čiščenje zraka: Rezultati raziskav učinkovitih fotokatalizatorjev so priveli do aplikativnega ARRS projekta v sodelovanju s Cinkarno Celje, katerega cilj je vgradnja fotokatalitske tehnologije z uporabo materialov pridobljenih iz Cinkarnine surovine v čistilce zraka notranjih prostorov.

Samočistilne površine: V sodelovanju s Cinkarno Celje so bili opravljeni testi po enoletnih vremenskih izpostavitvah naših samočistilnih površin. Rezultati so nadvse vzpodbudni – površine, prevlečene z našimi tankimi plastmi katalizatorja, so ostale praviloma čistejše in so ohranile večjo fotokatalitsko učinkovitost. Pripravljamo projekt s Steklarno Hrastnik za oplaščenje nekaterih njihovih izdelkov (svetila, vase) s tanko plastjo našega katalizatorja.

17. Ocenite, ali bi doseženi rezultati v okviru programa lahko vodili do ustanovitve spin-off podjetja, kolikšen finančni vložek bi zahteval ta korak ter kakšno infrastrukturo in opremo bi potrebovali

možnost ustanovitve spin-off podjetja	<input checked="" type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
potrebni finančni vložek	200.000EUR
ocena potrebne infrastrukture in opreme ¹⁹	Kemijski razvojni laboratorij, polindustrijski reaktorji, mešala, simulator sončne svetlobe...

18. Izjemni dosežek v 2012²⁰**18.1. Izjemni znanstveni dosežek**

Trenutni intenziven razvoj na področju alternativnih tehnologij ohlajevanja se med drugim osredotoča tudi na iskane novih, učinkovitih in okolju prijaznih elektrokaloričnih (EC) materialov. Ozko grlo pri tem razvoju so nizke EC temperturnih sprememb, ki jih je možno inducirati z električnim poljem. Nadaljen razvoj je usmerjen na različne segmente s poudarkom na razvoju teoretičnega razumevanja, izboljšanih EC materialov in inteligentnega oblikovanja

materialov. Ta članek podrobno povzema in kritično razpravlja o napredku, ki je bil do sedaj narejen na tem področju. Ponudi celovito sliko stanja, iz katere izlošči nova znanja in predлага prihodnje raziskovalne usmeritve. Povabilo k objavi v eni od najodmevnnejših revij na področju materialov s IF=18.216 je posebno priznanje avtorju članka in kaže na njegov ugled na tem znanstvenem področju.

M. Valant
Electrocaloric Materials for Future Solid-State Refrigeration Technologies
Prog. Mater. Sci. - 57, 980-1005 (2012).

18.2. Izjemni družbeno-ekonomski dosežek

Prof. Matjaž Valant koordinira projekt 7. Okvirnega Programa Evropske komisije (RegPot projekt z akronimom SUNGREN), ki je namenjen krepitevi raziskovalnih kapacitet s področja okoljski znanosti in novih nanomaterialov. Najpomebnejši kriterij Evropske komisije za dodelitev tega projekta je že obstoječa znanstvena odličnost raziskovalnih skupin. V okviru tega projekta bo lahko Univerza v Novi Gorici investirala približno 3.9 MEUR v izboljšanje raziskovalne in organizacijske strukture infrastrukture, raziskovalni kader, znanstveno in industrijsko sodelovanje itd. Za strateško podporo pri izvajanju aktivnosti so v projekt vključeni štirje vrhunski mednarodni raziskovalni centri: Imperial College London, sinhrotron Elletra, EPFL iz Švicerije in Delft University of Technology iz Nizozemske. Končni namen izvajanje tega projekta je, da raziskovalne skupine Univerze v Novi Gorici dosežejo polni raziskovalni in inovativni potencial in se celovito integrirajo v evropski raziskovalni prostor.

C. IZJAVE

Podpisani izjavljjam/o, da:

- so vsi podatki, ki jih navajamo v poročilu, resnični in točni
- se strinjamо z obdelavo podatkov v skladu z zakonodajo o varstvu osebnih podatkov za potrebe ocenjevanja in obdelavo teh podatkov za evidence ARRS
- so vsi podatki v obrazcu v elektronski obliki identični podatkom v obrazcu v papirnatih oblikah
- so z vsebino poročila seznanjeni in se strinjajo vsi izvajalci raziskovalnega programa

Podpisi:

zastopnik oz. pooblaščena oseba JRO
in/ali RO s koncesijo:

Univerza v Novi Gorici

in

vodja raziskovalnega programa:

Matjaž Valant

ŽIG

Kraj in datum: Nova Gorica | 24.2.2013

Oznaka prijave: ARRS-RPROG-ZP-2013/3

¹ Opredelite raziskovalno področje po klasifikaciji FOS 2007 (Fields of Science). Prevajalna tabela med raziskovalnimi področji po klasifikaciji ARRS ter po klasifikaciji FOS 2007 (Fields of Science) s kategorijami WOS (Web of Science) kot podpodročji je dostopna na spletni strani ARRS (<http://www.arrs.gov.si/sl/gradivo/sifrantji/preslik-vpp-fos-wos.asp>). [Nazaj](#)

² Napišite povzetek raziskovalnega programa v slovenskem jeziku (največ 3.000 znakov vključno s presledki – približno pol strani, velikost pisave 11) in angleškem jeziku (največ 3.000 znakov vključno s presledki – približno pol strani, velikost pisave 11). [Nazaj](#)

³ Napišite kratko vsebinsko poročilo, v katerem predstavite raziskovalno hipotezo in opis raziskovanja. Navedite ključne ugotovitve, znanstvena spoznanja, rezultate in učinke raziskovalnega programa in njihovo uporabo ter sodelovanje s tujimi partnerji. Največ 12.000 znakov vključno s presledki (približno dve strani, velikosti pisave 11). [Nazaj](#)

⁴ Realizacija raziskovalne hipoteze. Največ 3.000 znakov vključno s presledki (približno pol strani, velikosti pisave 11). [Nazaj](#)

⁵ V primeru bistvenih odstopanj in sprememb od predvidenega programa dela raziskovalnega programa, kot je bil zapisan v predlogu raziskovalnega programa oziroma v primeru sprememb, povečanja ali zmanjšanja sestave programske skupine v zadnjem letu izvajanja raziskovalnega programa, napišite obrazložitev. V primeru, da sprememb ni bilo, to navedite. Največ 6.000 znakov vključno s presledki (približno ena stran, velikosti pisave 11). [Nazaj](#)

⁶ Navedite znanstvene dosežke (največ pet), ki so nastali v okviru tega programa. Raziskovalni dosežek iz obdobja izvajanja programa (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](#)

⁷ Navedite družbeno-ekonomske dosežke (največ pet), ki so nastali v okviru tega programa. Družbeno-ekonomski dosežek iz obdobja izvajanja programa (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 ustavnovitev podjetja kot rezultat programa ... - v obeh primerih ni COBISS ID). [Nazaj](#)

⁸ Navedite rezultate raziskovalnega programa iz obdobja izvajanja programa (do oddaje zaključnega poročila) v primeru, da katerega od rezultatov ni mogoče navesti v točkah 7 in 8 (npr. ker se ga v sistemu COBISS ne vodi). Največ 2.000 znakov vključno s presledki (približno 1/3 strani, velikost pisave 11). [Nazaj](#)

⁹ Pomen raziskovalnih rezultatov za razvoj znanosti in za razvoj Slovenije bo objavljen na spletni strani: <http://sicris.izum.si/> za posamezen program, ki je predmet poročanja. [Nazaj](#)

¹⁰ Največ 4.000 znakov vključno s presledki. [Nazaj](#)

¹¹ Največ 4.000 znakov vključno s presledki. [Nazaj](#)

¹² Upoštevajo se le tiste diplome, magisteriji znanosti in doktorati znanosti (zaključene/i v obdobju 1. 1. 2009 – 31. 12. 2012), pri katerih so kot mentorji sodelovali člani programske skupine. [Nazaj](#)

¹³ Vpišite število opravljenih diplom v času trajanja raziskovalnega programa glede na vrsto usposabljanja. [Nazaj](#)

¹⁴ Vpišite šifro raziskovalca in/ali ime in priimek osebe, ki je v času trajanja raziskovalnega programa pridobila naziv magister znanosti in/ali doktor znanosti ter označite doseženo izobrazbo. V primeru, da se je oseba usposabljala po programu Mladi raziskovalci, označite MR. [Nazaj](#)

¹⁵ Za mlade raziskovalce, ki ste jih navedli v tabeli 11.2. točke (usposabljanje so uspešno zaključili v obdobju od 1. 1. 2009 do 31. 12. 2012), ustrezeno označite, kje so se zaposlili po zaključenem usposabljanju. [Nazaj](#)

¹⁶ Navedite naslove projektov in ime člana programske skupine, ki je bil vodja/koordinator navedenega projekta. Največ 3.000 znakov vključno s presledki (približno pol strani, velikosti pisave 11). [Nazaj](#)

¹⁷ Navedite naslove projektov, ki ne sodijo v okvir financiranja ARRS (npr: industrijski projekti, projekti za druge naročnike, državno upravo, občine idr.) in ime člana programske skupine, ki je bil vodja/koordinator navedenega projekta. Največ 3.000 znakov vključno s presledki (približno pol strani, velikosti pisave 11). [Nazaj](#)

¹⁸ Opišite možnosti za uporabo rezultatov v praksi. Opišite izdelke oziroma tehnologijo in potencialne trge oziroma tržne niše, v katere sodijo. Ocenite dodano vrednost izdelkov, katerih osnova je znanje, razvito v okviru programa oziroma dodano vrednost na zaposlenega, če jo je mogoče oceniti (npr. v primerih, ko je rezultat izboljšava obstoječih tehnologij oziroma izdelkov). Največ 3.000 znakov vključno s presledki (približno pol strani, velikosti pisave 11). [Nazaj](#)

¹⁹ Največ 1.000 znakov vključno s presledki (približno 1/6 strani, velikost pisave 11) [Nazaj](#)

²⁰ Navedite en izjemni znanstveni dosežek in/ali en izjemni družbeno-ekonomski dosežek raziskovalnega programa v letu 2012 (največ 1000 znakov, vključno s presledki, velikost pisave 11). 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 priponko/-i k temu poročilu. Vzorec diapositiva je objavljen na spletni strani ARRS <http://www.arrs.gov.si/sl/gradivo/>, predstavite dosežkov za pretekla leta pa so objavljena na spletni strani <http://www.arrs.gov.si/sl/analize/dosez/>. [Nazaj](#)

Zaključno poročilo raziskovalnega programa - 2013

Obrazec: ARRS-RPROG-ZP/2013 v1.00
C3-FA-EA-0B-B0-99-4B-97-C7-D4-A2-DE-5E-D8-83-84-6E-A8-4C-54

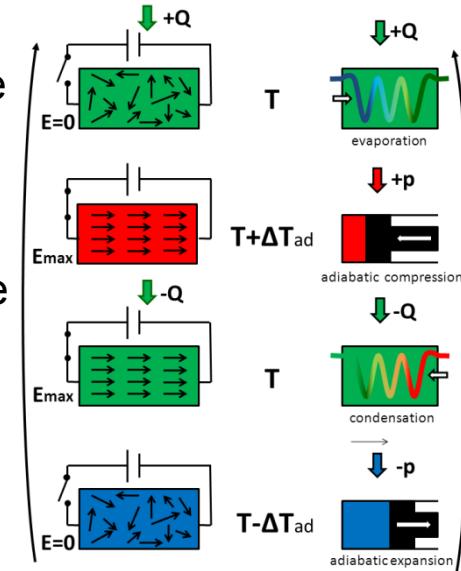
TEHNIKA

Področje: 2.04 – Materiali

Konceptualne rešitve razvoja novih elektrokaloričnih materialov za alternativne tehnologije ohlajanja

Vir: Matjaz VALANT, Electrocaloric Materials for Future Solid-State Refrigeration Technologies, Prog. Mater. Sci. - 57, 980-1005 (2012).

Trenutni intenziven razvoj na področju alternativnih tehnologij ohlajevanja se med drugim osredotoča tudi na iskane novih, učinkovitih in okolju prijaznih elektrokaloričnih (EC) materialov. Ozko grlo pri tem razvoju so nizke EC temperaturnih spremembe, ki jih je možno inducirati z električnim poljem. Ta članek podrobno povzema in kritično razpravlja o napredku, ki je bil do sedaj narejen na tem področju. Ponudi celovito sliko stanja, iz katere izlošči nova znanja in predlaga primerjavi prihodnje raziskovalne usmeritve.



Slika. Elektrokalorični cikel v

s kompresorskim hladilnikom

Na osnovi analize stanja so bile identificirane naslednje usmeritve in koncepti za nadaljnji razvoj EC materialov:

- Zmanjšanje električne prevodnosti ionskim solem, ki kažejo visoke EC temperaturne spremembe
- Raziskave nekonvencionalnih sistemov kot so organski kristali in molekule, vodne raztopine, tekoči kristali...
- Izkoriščanje anizotropije EC efekta
- Optimizacija dielektrične prebojne trdnosti
- Razvoj relaksorskih feroelektrikov z visoko prebojno trdnostjo in izkoriščanje njihovega dvojnega EC maksimuma
- Intelegeten inženiring hladilnega ciklusa in komponent hladilnika