

Oznaka poročila: ARRS-RPROG-ZP-2015/170



ZAKLJUČNO POROČILO O REZULTATIH RAZISKOVALNEGA PROGRAMA

(za obdobje 1. 1. 2009 - 31. 12. 2014)

A. PODATKI O RAZISKOVALNEM PROGRAMU

1. Osnovni podatki o raziskovalnem programu

Šifra programa	P2-0148
Naslov programa	Večfazne nanoarhitekture: razvoj, fizikalno-kemijska karakterizacija in simulacije procesov Multiphase nanoarchitectures: development, physical-chemical characterization and simulation of processes
Vodja programa	582 Miran Gabersšek
Obseg raziskovalnih ur (vključno s povečanjem financiranja v letu 2014)	51000
Cenovni razred	C
Trajanje programa	01.2009 - 12.2014
Izvajalci raziskovalnega programa (javne raziskovalne organizacije - JRO in/ali RO s koncesijo)	104 Kemijski inštitut 106 Institut "Jožef Stefan"
Raziskovalno področje po šifrantu ARRS	1 NARAVOSLOVJE 1.04 Kemija
Družbeno-ekonomski cilj	13.01 Naravoslovne vede - RiR financiran iz drugih virov (ne iz SUF)
Raziskovalno področje po šifrantu FOS	1 Naravoslovne vede 1.04 Kemija

B. REZULTATI IN DOSEŽKI RAZISKOVALNEGA PROGRAMA

2. Povzetek raziskovalnega programa¹

SLO

IZHODIŠČE

Znanost o materialih lahko že v bližnji prihodnosti odločilno prispeva k napredku na dveh strateških področjih človekovega delovanja in bivanja: k reševanju energetske problematike in k izboljšanju zdravja delovno vedno bolj obremenjene in v povprečju vedno bolj stare populacije. Učinkovitost, zanesljivost in trajnost materialov v smislu opravljanja določene funkcije je zelo odvisna od njegove strukturiranosti. Strukturiranje, tako na mikro- kot na nano-nivoju, dobro obvladamo v primeru enostavnih materialov, vendar funkcionalni materiali običajno vsebujejo mnogo faz (do 5). Raziskave nakazujejo, da lahko delovanje funkcionalnih materialov precej izboljšamo, če tipično velikost vsebovanih faz zmanjšamo na nanodimenzije (bateriji povečamo energijsko gostoto in moč, zdravilo se bolj kontrolirano sprošča itd.).

RAZISKOVALNI KONCEPTI IN PRISTOPI

Dobro organizirane funkcionalne večfazne nanoarhitekture bomo lahko pripravili le, če bomo najprej razumeli tako lastnosti posameznih nanofaz kot tudi interakcije, ki med njimi nastopajo. Pri tem nekateri fundamentalni izzivi ostajajo odprti: teoretično modeliranje celotnega nanometrijskega delca, razumevanje anomalnih pojavov pri manjšanju dimenzij pod ca. 15 nm ipd. Še manj je poznana narava interakcij med posameznimi nanodelci, še posebej nanodelci različnih faz. Menimo, da je prav to glavni vzrok za počasen napredek pri pripravi večfaznih organiziranih nanoarhitektur. V programu bomo te interakcije obravnavali tako teoretično kot s pomočjo sodobnih eksperimentalnih tehnik.

Pridobljena znanja bomo nato izkoristili za pripravo izbranih modelskih in realnih večfaznih nanoarhitektur z izboljšano urejenostjo. Pri tem bomo izhajali tako iz znanih tehnik, ki temeljijo na organizaciji posameznih molekul (samourejanje ipd.) in nadaljnji rasti v nanofaze kot iz obratne smeri, torej iz makroskopskih sinteznih metod, ki pri natančno določenih pogojih vodijo do kontroliranega nastanka urejenih nanofaz. V naslednji fazi programa bomo sistematično proučevali vpliv urejenosti na nanonivoju na makroskopske lastnosti pripravljenih materialov. Poleg pričakovanega izboljšanja funkcionalnosti pričakujemo tudi nekatere specifične učinke, ki bodo posledica specifičnih interakcij med različnimi nanodelci.

APLIKACIJE

Na področju baterij bomo za shranjevanje energije lahko izkoriščali materiale, ki jih je v izobilju v zemeljski skorji, so poceni in stoodstotno reciklabilni. Na področju zdravil bomo lahko kontrolirano izkoriščali biološke substance – denimo z reverzibilnim pripenjanjem na nanodelce. V tehnološke in biomedicinske materiale bomo lahko vgradili samo-organizirajoče se (*angl. self assembled*) plasti z enkapsuliranimi inhibitorскими substancami v obliki nanoporoznih plasti ali nano-rezervoarjev, in super-hidrofobnih plasti. Verjamemo, da se bo dokončno odprla možnost priprave samo-zdravilnih materialov (*self-healing*), ki imajo sposobnost ne samo občutiti nastanek defekta v materialu, ampak tudi defekt odpraviti.

ANG

BACKGROUND

Already in the near future, Materials science may provide essential contribution to the solution of two major challenges of present human endeavor: it has great potential to solve the energy crisis and it can greatly contribute to improvement of the health of the continuously aging population. The efficiency, reliability and durability of functional materials crucially depends on their structuring - on all scales. Most advanced functional materials consist of many phases. Recent investigations have indicated that the functionality of these complex materials could be significantly improved if we were able to minimize the size of most phases to the nanoscopic level and, in particular, precisely organize such small phases into carefully designed nanoarchitectures. For example, such an organized battery electrode would exhibit an increased energy and power density, an organized drug composite would very precisely release the drug compound etc.

RESEARCH CONCEPTS

Highly organized multiphase nanoarchitectures can only be effectively prepared if we first understand both the properties of individual nanophases as well as the nature and magnitude of inter-phase interactions under various conditions. Here many fundamental questions are still open: how to theoretically model a whole nanoparticle-including the surfaces, the reason for observed anomalies in the range below ca. 15 nm, etc. Even less is known about the nature of interactions between individual nanoparticles of different composition. We believe that this poor knowledge is the main obstacle to faster development in the field of nanoarchitecturing involving multiple phases. Within the Programme we try to tackle this problem both theoretically and experimentally by combined use of advanced techniques. The gained

knowledge will be used for preparation of model and realistic multi-phase composites with improved nanoarchitecturing.

In the next stage we will systematically investigate the influence of ordering on nanolevel on the macroscopic materials properties. Beside the expected improvement of functionality, we also envisage occurrence of several unexpected phenomena due to specific interactions between nanophases.

APPLICATIONS

In the field of batteries we will be able to exploit, for the first time, poorly conductive or even insulating compounds that are found in abundance in earth crust – which makes them very cheap and 100 % recyclable. Similarly, in the field of drugs we will be able to exploit biological substances in a perfectly controlled way – for example by reversibly attaching them to nanoparticles. In the field of protective coatings, a new field of self-healing compounds will be developed. These compounds will have the ability of not only to »sense« the defect in the coating but also to repair it. Alternatives will include either classical coatings, self-assembled layers with encapsulated active inhibitors, nanoporous layers and nano-reservoirs, super-hydrophobic layers.

3. Poročilo o realizaciji predloženega programa dela na raziskovalnem programu, (vključno s predloženim dopolnjenim programom dela v primeru povečanja financiranja raziskovalnega programa v letu 2014)²

SLO

V celoti smo sledili glavnim usmeritvam programa, kot je bil zastavljen leta 2008.

Osredotočili smo se na razvoj A) materialov za energetski sektor ter B) materialov za zdravje.

V nadaljevanju poročamo o nekaterih glavnih rezultatih v obeh sektorjih raziskav (zaradi omejenega prostora žal ne moremo zajeti vseh rezultatov).

A) Materiali za energetski sektor:

1. Baterijski materiali

- a) na teoretičnem nivoju smo razložili napetostno histerezo med polnjenjem in praznjenjem (objavljeno v Nature Materials) multifazne baterijske elektrode, razložili smo vpliv kontaktiranja na transport in imedancijski odziv baterijski transport, postavili smo splošni model sproščanja faz iz poroznih sistemov (uporabno od baterij do kompozitnih materialov v farmaciji itd)
- b) na aplikativnem področju smo demonstrirali izrazito povečano obstojnost organskih baterijskih materialov s pripenjanjem (grafting) na netopne substrate s povečano površino (objavljeno v Angewandte Chemie)
- c) izumili smo nov način sinteze strateškega insercijskega materiala LiMnPO_4 , demonstrirali njegovo visoko kapaciteto in obstojnost pri cikliranju
- d) Pripravili smo nove tipe poroznih elektrod in separatorjev za litij-žveplove akumulatorje

2. Materiali za gorivne celice

- a) Izumili smo nov material na osnovi zlitine baker-platina s 3-5 krat povečano elektrokatalitsko aktivnostjo in povečano stabilnostjo v elektrokemijskem okolju in ga mednarodno patentirali
- b) Uvedli smo novo tehniko mikroskopiranja materialov med degradacijo - tako imenovano "identical location scanning electron microscopy, IL_SEM". Njeno uporabnost smo prikazali v več člankih
- c) Identificirali, opisali in razložili smo pojav raztapljanja in redipozicije platine v kompozitnem nanosu ogljik-platina med delovanjem gorivne celice
- d) kot prvi smo identificirali pojav degradacije platinskih nanodelcev v katodni smeri napetostnega preleta

B) Materiali in raziskave za boljše zdravje

1. Študij korozije materialov

Študirali smo korozijo različnih materialov, ki se med drugim uporabljajo tudi v bioloških aplikacijah, implantatih itd. S teoretičnimi (DFT) metodami in eksperimenti smo pokazali inhibicijski učinek različnih spojin (triazoli, njegovi amino derivati ipd) na površini izbranih kovin.

2. Strukturne študije površin

V izbranih raziskavah smo proučevali vpliv tujih ionov ali molekul na strukturo kovinskih substratov. Ena od modelskih kovina je bil denimo baker, in sicer nas je zanimala njegova površina Cu(111). Z DFT študijami smo ugotavljali vpliv klora na to površino. V drugi študiji pa nas je zanimalo, kaj se zgodi pri interakciji etilena s to površino itd.

3. Na področju raziskav mehanizmov reakcij v plinskih fazah smo ugotavljali vpliv halogenacije na mehanizem atmosferskih reakcij med metilperoksi radikali in dušikovim oksidom. Nadalje so nas zanimala vzbujena stanja v sistemu XOONO (X=Cl, Br) ter teoretične študije reakcijskih mehanizmov pri interakciji CF₃S z NO₂.

4. Študije materialov za zdravje

Tudi v primeru materialov za zdravje je potekalo več paralelnih raziskav. V prvi smo proučevali nanokompozite, ki so vsebovali superparamagnetne nanodelce, v katere je bil vgrajen tudi rodamin 6G (uporaba za diagnostiko). V naslednji raziskavi smo superparamagnetne nanodelce oplaščili s poroznim silikatom in v slednjega vgradili okoli 30% zdravila. Ugotovili smo, da je sproščanje zdravila v tem primeru povsem reverzibilno in tudi hitro. V tretji raziskavi smo izumili način, kako stabilizirati nanodelce TiO₂ v oljnih suspenzijah. V zadnjem primeru smo v seriji člankov prikazali pripravo pametnih prevlek iz razvejanih polimerov (dendrimerov) na nanodelcih, ki so sposobne v porozne delce zapreti aktivno substanco in jo nato ob spremembi pH ali ob dodatku reducenta (modelni dejavnik) sprostiti v medij.

Sodelovanje s tujimi akademskimi partnerji (projekti, doktorati, članki)

Sodelovali smo na naslednjih tujih inštitucijah: Univerza v Amiensu, Francija (skupni doktorant in skupni magistrant, skupni članki), Univerza v Delftu, Nizozemska (skupni doktorant, članki), Univerza v Leidnu, Nizozemska (skupni doktorant, članki), Univerza v Montpellieru II, Francija (skupni doktorand, članki), Tehnična univerza v Gradcu, Avstrija (3-mesečno gostovanje), Max-Planck inštitut Potsdam (3-mesečno gostovanje, 2x), Max-Planck inštitut v Stuttgartu (skupna raziskava, članki), Weierstrass inštitut, Berlin (skupna raziskava, 5 člankov), Sodelovanje z MESO programom (evropski študijski program, II. bolonjska stopnja s področja baterij, 5 diplomantov).

Sodelovanje je potekalo tudi v okviru projektov MNT ERA NET II, SURFUNCTI (Milošev), MAT ERA NET (Dominko), RHISI-DCL-NanoComp (Milošev) (2010 - 2013), BI-HR/ 10-11: Milošev (2010 - 2011), BI-SR/ 10-11 (Milošev), BI-USA (Milošev), CEA bilateralni projekt med KI in CEA Grenoble, ALISTORE-ERI (evropski raziskovalni inštitut), Gaberšček, Dominko vodji dveh tematskih sklopov itd.

Uporaba rezultatov (industrijske raziskave)

Rezultate raziskav smo uporabili tako v aplikativnih študijah znotraj okvirov ARRS projektov, kot v okviru neposrednih naročil različnih slovenskih in tujih partnerjev. ARRS aplikativne projekte smo denimo izvajali v sodelovanju s podjetji JUB in Cinkarna Celje, Lek. Neposredne pogodbe smo imeli z naslednjimi industrijskimi partnerji: Honda (2 projekta), TAB Mežica, Aurora, Letrika, Cinkarna. Občasne raziskave smo izvajali za naslednje partnerje: Bolnišnica Valdoltra, Fotona, Melamin, LTH Casting, Goričane, Lek, Atotech ter Gazela Krško. V okviru EU projekta Eurolis (vodja Dominko) sodelujemo s podjetji Volvo, Saft, in Renault. Konec leta 2014 smo pridobili nov EU projekt (akronim "Helis", Obzorje2020), ki ga koordinira član programske skupine Robert Dominko. Pridobili smo tudi projekt NATO SfP (vodja: Miran Gaberšček).

4. Ocena stopnje realizacije programa dela na raziskovalnem programu in zastavljenih raziskovalnih ciljev³

SLO

Realizirali smo vse cilje, ki smo jih zastavili ob prijavi 2008. Primeri izvedenih raziskav, ki se navezujejo na vsebinsko jedro programa, so navedeni v točki 2 ter točki 4 tega poročila in jih tu ne ponavljamo. Poleg osnovnega programa smo izvedli še vrsto drugih raziskav, ki v prijavi niso bile predvidene, se pa smiselno navezujejo na vsebino. Primer so teoretične raziskave hidrofobnosti materialov (pomembne za pripravo novih materialov) ali pa praktičnih aplikacij v izdelkih slovenske ali tuje industrije (barvna, baterijska ipd). Skupno smo v okviru programske skupine od leta 2009 objavili 252 znanstvenih člankov, kar je skoraj 50 letno oziroma 10 na 1 FTE letno. Ti članki so bili citirani več kot 4000 krat, kar nedvomno potrjuje njihovo znanstveno relevantno.

Objavljali smo tudi v najbolj prestižnih revijah s področja materialov, kot so Nature Materials, Angewandte Chemie, Advanced Materials, ACS Nano, Journal of the American Chemical Society, Physical Review Letters ipd.

Na aplikativnem področju smo pridobili pomembne projekte. Mednje štejeta 2 projekta s Hondo ter vodenje najpomembnejšega EU projekta s področja litij-žveplovih baterij Eurodis. Poleg tega smo sodelovali še z več kot 20 partnerji (našteti v prejšnji točki). Sodelujemo v evropskem raziskovalnem inštitutu ALISTORE-ERI, v katerega je včlanjenih 20 najboljših evropskih laboratorijev s področja baterij in 12 velikih EU podjetij (Dominko in Gaberšček sta vodila dva tematska sklopa). Vodja programa je ustanovil in vodil Center odličnosti nizkoogljice tehnologije (CO NOT). Organizirali smo 2 svetovna simpozija, enega na temo elektromobilnosti v letu 2012 (190 udeležencev iz 14 držav), drugega na temo elektrokemije (205 udeležencev iz 16 držav).

V okviru programske skupine je dokončalo doktorat 18 raziskovalcev, magistriralo oziroma diplomiralo na različnih stopnjah pa 30.

Odlično delo raziskovalcev se nenazadnje zrcali tudi v nagradah, ki so jih prejeli sodelavci programa. Gaberšček je prejel Zoisovo in Preglovo nagrado, Kokalj in Dominko pa Preglovo. Tudi ostali sodelavci so prejeli več kot 10 različnih nagrad.

5. Utemeljitev morebitnih sprememb programa raziskovalnega programa oziroma sprememb, povečanja ali zmanjšanja sestave programske skupine v letu 2014⁴

SLO

Ni bilo bistvenih sprememb.

6. Najpomembnejši znanstveni rezultati programske skupine⁵

Znanstveni dosežek			
1.	COBISS ID	4476186	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Nov teoretični model za razlago histereze v mnogodelčnih sistemih
		ANG	The thermodynamic origin of hysteresis in insertion batteries
	Opis	SLO	Novi termodinamski model uvaja nov pogled na izgube v insercijskih shranjevalnih sistemih. Gre za splošen matematičen model, ki ne velja le v baterijah, temveč tudi v shranjevalnikih vodika, superkondenzatorjih..., ter celo v navadnih gumijastih balonih, če jih povežemo v klaster preko skupnega dovoda plina. Odkritje je bilo objavljeno v prestižni reviji Nature Materials (faktor vpliva 29.9). Dognanja v tem članku so bila kasneje dodatno opisana v člankih: DREYER, GABERŠČEK, GUHLKE, HUTH, JAMNIK, Janko. European journal of applied mathematics, ISSN 0956-7925, 2011, vol. 22, iss. 3, str. 267-289, doi: 10.1017/S0956792511000052. MOŠKON, JAMNIK, GABERŠČEK, Solid state ionics, ISSN 0167-2738. [Print ed.], 2013, vol. 238, str. 24-29.

	ANG		We presented, for the first time, a general explanation of the occurrence of inherent hysteretic behaviour in storage systems containing multiple particles. We demonstrated the generality of our concept not only by performing careful electrochemical experiments on a typical electrode such as LiFePO₄ but also by referring to other multiparticle storage system, such as supercapacitors, hydrogen storage materials, and even a most simple mechanical storage device - ordinary rubber balloons. The discovery was published in Nature Materials. This discovery was afterwards extended in several papers: DREYER, GABERŠČEK, GUHLKE, HUTH, JAMNIK, Janko. European journal of applied mathematics, ISSN 0956-7925, 2011, vol. 22, iss. 3, str. 267-289, doi: 10.1017/S0956792511000052. MOŠKON, JAMNIK, GABERŠČEK, Solid state ionics, ISSN 0167-2738. [Print ed.], 2013, vol. 238, str. 24-29	
	Objavljeno v		Nature Pub. Group; Nature materials; 2010; Vol. 9; str. 448-453; Impact Factor: 29.897; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.13; A'': 1; A': 1; WoS: EI, PM, UB, UK; Avtorji / Authors: Dreyer Wolfgang, Jamnik Janko, Guhlke Clemens, Huth Robert, Moškon Jože, Gaberšček Miran	
	Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek	
	2. COBISS ID		34436869	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Elektroaktivne organske molekule, stabilizirane na trdnih netopnih nosilcih	
		ANG	Electroactive organic molecules immobilized onto solid nanoparticles as a cathode material for lithium-ion batteries	
	Opis	SLO	Problem topnosti organskih molekul v litijevih baterijah smo razrešili tako, da smo organske molekule pripeli s kovalentno vezjo na površino ustreznega netopnega substrata. S tem organsko molekulo ne le stabiliziramo temveč lahko tudi – preko izbire ustreznega substrata - modificiramo njene elektrokemijske lastnosti (na primer redoks potencial ipd.). Odkritje je bilo objavljeno v prestižni reviji Angewandte Chemie International Edition (faktor vpliva 12.7). Odkritje se navezuje tudi na sorodne ali kasnejše članke: GENORIO et al. Nature materials, ISSN 1476-1122, 2010, vol. 9, no. 12, str. 998-1003. PIRNAT et al., Journal of power sources, 2012, vol. 199, str. 308-314 PIRNAT et al. Journal of power sources, 2013, vol. 235, str. 214-219	
		ANG	The problem of inherent solubility of organic molecules in lithium batteries was solved by grafting active organic molecules onto the surface of insoluble inorganic nanoparticles. This way, the organic molecule is not only stabilized; using appropriate substrate it is also possible to tune certain electrochemical properties such as the redox potential etc. The discovery was published in Angewandte Chemie International Edition (impact factor 12.7). This discovery was related to or afterwards extended in several papers: GENORIO et al. Nature materials, ISSN 1476-1122, 2010, vol. 9, no. 12, str. 998-1003. PIRNAT et al., Journal of power sources, 2012, vol. 199, str. 308-314 PIRNAT et al. Journal of power sources, 2013, vol. 235, str. 214-219	
	Objavljeno v		Wiley-VCH; Angewandte Chemie; 2010; Vol. 49, no. 40; str. 7222-7224; Impact Factor: 12.730; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.761; A'': 1; A': 1; WoS: DY; Avtorji / Authors: Genorio Boštjan, Pirnat Klemen, Cerc Korošec Romana, Dominko Robert, Gaberšček Miran	
	Tipologija		1.03 Kratki znanstveni prispevek	
3.	COBISS ID		4816666	Vir: COBISS.SI

	Naslov		SLO	Katodni kompoziti za Li-S baterije
			ANG	Cathode composites for Li-S batteries via the use of oxygenated porous architectures
	Opis	SLO	Baterije litij-žveplo so zanimive zaradi nizke cene, ker so okolju prijazne in imajo visoko energijsko gostoto. Ker pa se pri njihovem delovanju tvorijo polisulfidi, je njihova življenjska doba kratka. V članku predstavljamo novo strategijo, kako zaobiti problem topnih polisulfidov. Uporabili smo kovinske organska ogrodja (MOF) in z njimi impregnirali katodni material. Površinske interakcije med MOF in polisulfidi ugodno vplivajo na stabilnost delovanja takšnih katodnih kompozitov. Članek je bil objavljen v prestižni reviji Journal of the American Chemical Society.	
		ANG	Li-S rechargeable batteries are attractive for electric transportation because of their low cost, environmentally friendliness, and superior energy density. However, the Li-S system has yet to conquer the marketplace, owing to its drawbacks, namely, soluble polysulfide formation. To tackle this issue, we present here a strategy based on the use of a mesoporous chromium trimesate metal-organic framework (MOF) named MIL-100(Cr) as host material for sulfur impregnation. Electrodes containing sulfur impregnated within the pores of the MOF were found to show a marked increase in the capacity retention of Li-S cathodes. Complementary transmission electron microscopy and X-ray photoelectron spectroscopy measurements demonstrated the reversible capture and release of the polysulfides by the pores of MOF during cycling and evidenced a weak binding between the polysulphides and the oxygenated framework. Such an approach was generalized to other mesoporous oxide structures, such as mesoporous silica, for instance SBA-15, having the same positive effect as the MOF on the capacity retention of Li-S cells. Besides pore sizes, the surface activity of the mesoporous additives, as observed for the MOF, appears to also have a pronounced effect on enhancing the cycle performance. Increased knowledge about the interface between polysulfide species and oxide surfaces could lead to novel approaches in the design and fabrication of long cycle life S electrodes.	
	Objavljeno v		American Chemical Society; Journal of the American Chemical Society; 2011; Vol. 133, no. 40; str. 16154-16160; Impact Factor: 9.907;Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 3.001; A'': 1;A': 1; WoS: DY; Avtorji / Authors: Demir-Cakan Rezan, Morcrette Mathieu, Nouar Farid, Davoisne C., Devic Thomas, Gonbeau Danielle, Dominko Robert, Serre Christian, Férey Gérard, Tarascon Jean-Marie	
Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek		
4.	COBISS ID		24105255	Vir: COBISS.SI
	Naslov		SLO	Faktorji vpliva inhibicijske aktivnosti
			ANG	What determines the inhibition effectiveness of ATA, BTAH, and BTAOH corrosion inhibitors on copper?
	Opis	SLO	Elektrokemijski eksperimenti so nedvoumo pokazali, da sta BTAH in ATA bistveno boljša inhibitorja korozije Cu v Cl- mediju kot BTAOH. Zanimivo je, da sta si BTAH in BTAOH med seboj zelo podobna po elektronskih lastnostih, ki jih ponavadi povezujejo s sposobnostjo inhibicije korozije. Z originalnim pristopom opisa adsorpcije na fazni meji kovina/voda smo z natančno analizo rezultatov obsežnih DFT simulacij pokazali, da odlično inhibicijsko delovanje BTAH in ATA lahko pripišemo nastanku močnih N-Cu kemijskih vezi, ki jih tvorita ti dve molekuli v deprotonirani obliki.	
			Electrochemical experiments undoubtedly showed that BTAH and ATA are much more effective inhibitors of corrosion for Cu in Cl- media than BTAOH, despite the fact that BTAH and BTAOH display very similar molecular electronic structure properties usually associated with the ability of	

		ANG	molecule to inhibit the corrosion. We introduce an original approach to treat the adsorption at an electrified surface and carefully analyzed the results of extensive DFT simulation, what allowed us to pinpoint the superior inhibiting action of BTAH and ATA.
	Objavljeno v		American Chemical Society; Journal of the American Chemical Society; 2010; Vol. 132, no. 46; str. 16657-16668; Impact Factor: 9.019; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.761; A'': 1; A': 1; WoS: DY; Avtorji / Authors: Kokalj Anton, Peljhan Sebastijan, Finšgar Matjaž, Milošev Ingrid
	Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek
5.	COBISS ID	4783386	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	In situ opazovanje nastajanja mreže nanodelcev v ionskih tekočinah
		ANG	In situ recording of particle network formation in liquids by ion conductivity measurements
	Opis	SLO	Nastanek fraktalnih silikatnih mrež iz začetnega koloidnega stanja smo opazovali z in situ merjenji prevodnosti sistema. Osnovna za pojav in meritev je visoka medfazna prevodnost za litijev ion, ki se vzpostavi, ko pridejo neprevodni nanodelci v stik ustežno litijevo soljo. Poskuse smo teoretično napovedali z Monte Carlo simulacijami in dodatno preverili s konfokalno mikroskopijo. Članek je bil objavljen v prestižni reviji Journal of the American Chemical Society.
		ANG	The formation of fractal silica networks from a colloidal initial state was followed in situ by ion conductivity measurements. The underlying effect is a high interfacial lithium ion conductivity arising when silica particles are brought into contact with Li salt-containing liquid electrolytes. The experimental results were modeled using Monte Carlo simulations and tested using confocal fluorescence laser microscopy and [xi]-potential measurements.
	Objavljeno v		American Chemical Society; Journal of the American Chemical Society; 2011; Vol. 133, no. 37; str. 14514-14517; Impact Factor: 9.907; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 3.001; A'': 1; A': 1; WoS: DY; Avtorji / Authors: Pfaffenhuber Christian, Sörgel Seinz, Weichert Katja, Bele Marjan, Mundiger Tabea, Göbel Marcus, Maier Joachim
	Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek

7. Najpomembnejši družbeno-ekonomski rezultati programske skupine⁶

	Družbeno-ekonomski dosežek		
1.	COBISS ID	36680197	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Mentorstvo doktorandom
		ANG	Mentorships to PhD students
			Dosežek: Mentorstvo doktorandom (D.09) Opis dosežka: Člani programske skupine so bili mentorji 18 doktorandom, ki so v letih 2009-2014 uspešno zagovarjali doktate: 1. TOPOLOVEC, Matevž. Vpliv vrste obremenilnega sklopa na preživetje umetnih kolčnih sklepov : doktorska disertacija = Influence of bearing surfaces on survivorship of total hip replacements : doctoral dissertation. Ljubljana, 2014. [COBISS.SI-ID 273304832] 2. ŽNIDARŠIČ, Andrej. Funkcionalizacija nanocevk s posameznimi molekulami in mikroskopska karakterizacija za nove senzorske naprave : doktorska disertacija. Ljubljana, 2013. [COBISS.SI-ID 269380864] 3. KOVAČEVIĆ, Nataša. Interactions of azole corrosion inhibitors with

	Opis	transition metal surfaces : doctorate dissertation. Ljubljana: [N. Kovačević], 2013. VIII, VI, 85 str., ilustr. [COBISS.SI-ID 36680197] 4. KHATIB, Rémi. The origins of voltage hysteresis in Li-ion batteries : doctoral dissertation. Ljubljana; Montpellier, 2013 [COBISS.SI-ID 36730117] 5. GODEC, Aljaž. Many-body correlations in hydrophobic interactions : doctoral thesis. Ljubljana: [A. Godec], 2012. [COBISS.SI-ID 2418788] 6. PELJHAN, Sebastijan. Simulations of corrosion inhibition mechanisms of benzotriazole as copper corrosion inhibitor in chloride media : doctorate dissertation. Ljubljana, 2012. [COBISS.SI-ID 260932096] Nagrada: Nagrada Maksa Samca za doktorsko disertacijo s področja kemije 7. SIRISOPANAPORN, Chutchamon. Structural [!] and electrochemical [!] properties of $\text{Li}_{\text{sub}}2\text{MSiO}_{\text{sub}}4$ (M = Fe, Mn, Co) cathode materials for Li-ion batteries : dissertation thesis. Ljubljana, 2011. [COBISS.SI-ID 35517445] 8. FINŠGAR, Matjaž. Benzotriazolni in polietileniminski inhibitorji korozije bakra in jekla v kloridnih raztopinah : doktorska disertacija. Ljubljana, 2010. [COBISS.SI-ID 253815552] 9. KÜZMA, Mirjana. Electrochemically wired cathode titanates for Li-ion batteries : doctoral dissertation = Elektrokemijsko ožičeni titanati za litij ionske baterije : doktorska disertacija. Ljubljana, 2010. [COBISS.SI-ID 251133440] 10. GENORIO, Boštjan. Funkcionalizacije površin elektroaktivnih materialov z organskimi molekulami : doktorska disertacija. Ljubljana, 2009. [COBISS.SI-ID 30608389] 11. NADRAH, Peter. Funkcionalizacija poroznih silikatnih delcev za nadzorovano sproščanje učinkovin = Functionalization of porous silica particles for controlled release of drugs : doktorska disertacija. Ljubljana: 2013. [COBISS.SI-ID 267996416] 12. PIRNAT, Klemen. Litijevi ionski akumulatorji na osnovi redoks aktivnih organskih molekul : Klemen Pirnat. Ljubljana: 2013. [COBISS.SI-ID 266454528] 13. KOVAČ, Simon. Vpliv različnih kontaktnih površin kolčnih endoprotez (kovina-polietilen in kovina-kovina) na srednjeročne rezultate kliničnih in radioloških analiz : [doktorska disertacija]. [Ankaran: S. Kovač, 2012]. [COBISS.SI-ID 265093376] 14. MAVER, Uroš. Funkcionalizacija površin za razvoj dostavnih sistemov učinkovin za ciljano zdravljenje = Functionalization of surfaces for the development of drug delivery systems for targeted therapy : doktorska disertacija. Ljubljana: [COBISS.SI-ID 257914112] 15. ERJAVEC, Boštjan. Nanostrukturirani kompoziti za litijeve ionske akumulatorje visokih moči : doktorska disertacija. Ljubljana: [B. Erjavec], 2011. [COBISS.SI-ID 4646682] 16. MOŠKON, Jože. Elektrokemijski mehanizmi v pozitivnih elektrodah za litij ionske baterije : doktorska disertacija. Ljubljana: [J. Moškon], 2010. [COBISS.SI-ID 1090399] 17. FIGURSKA, Małgorzata. Mechanical, histological and biological analysis of artificial joint loosening : doctoral thesis = [Rozprawa doktorska]. Wrocław:, 2010. [COBISS.SI-ID 23500071] 18. HRIBERNIK, Silvo. Študij predobdelave in oplaščanja regeneriranih celuloznih vlaken z nano delci : doktorska disertacija. [Maribor: S. Hribernik], 2010. VII, 171 f., ilustr., preglednice. http://dkum.uni-mb.si/Dokument.php?id=16267. [COBISS.SI-ID 252288256] Achievement: mentorships to doctorands: Members of programme have been mentors to 18 Ph.D. students who successfully finished their PhDs: 1. TOPOLOVEC, Matevž. Vpliv vrste obremenilnega sklopa na preživetje umetnih kolčnih sklepov : doktorska disertacija = Influence of bearing
--	------	---

		surfaces on survivorship of total hip replacements : doctoral dissertation. Ljubljana, 2014. [COBISS.SI-ID 273304832] 2. ŽNIDARŠIČ, Andrej. Funkcionalizacija nanocevk s posameznimi molekulami in mikroskopska karakterizacija za nove senzorske naprave : doktorska disertacija. Ljubljana, 2013. [COBISS.SI-ID 269380864] 3. KOVAČEVIČ, Nataša. Interactions of azole corrosion inhibitors with transition metal surfaces : doctorate dissertation. Ljubljana: [N. Kovačević], 2013. VIII, VI, 85 str., ilustr. [COBISS.SI-ID 36680197] 4. KHATIB, Rémi. The origins of voltage hysteresis in Li-ion batteries : doctoral dissertation. Ljubljana; Montpellier, 2013 [COBISS.SI-ID 36730117] 5. GODEC, Aljaž. Many-body correlations in hydrophobic interactions : doctoral thesis. Ljubljana: [A. Godec], 2012. [COBISS.SI-ID 2418788] 6. PELJHAN, Sebastijan. Simulations of corrosion inhibition mechanisms of benzotriazole as copper corrosion inhibitor in chloride media : doctorate dissertation. Ljubljana, 2012. [COBISS.SI-ID 260932096] Nagrada: Nagrada Maksa Samca za doktorsko disertacijo s področja kemije 7. SIRISOPANAPORN, Chutchamon. Strucutral [!] and electrochemcial [!] properties of Li[sub]2MSiO[sub]4 (M = Fe, Mn, Co) cathode materials for Li-ion batteries : disertation thesis. Ljubljana, 2011. [COBISS.SI-ID 35517445] 8. FINŠGAR, Matjaž. Benzotriazolni in polietileniminski inhibitorji korozije bakra in jekla v kloridnih raztopinah : doktorska disertacija. Ljubljana, 2010. [COBISS.SI-ID 253815552] 9. KÜZMA, Mirjana. Electrochemically wired cathode titanates for Li-ion batteries : doctoral dissertation = Elektrokemijsko ožičeni titanati za litij ionske baterije : doktorska disertacija. Ljubljana, 2010. [COBISS.SI-ID 251133440] ANG 10. GENORIO, Boštjan. Funkcionalizacije površin elektroaktivnih materialov z organskimi molekulami : doktorska disertacija. Ljubljana, 2009. [COBISS.SI-ID 30608389] 11. NADRAH, Peter. Funkcionalizacija poroznih silikatnih delcev za nadzorovano sproščanje učinkovin = Functionalization of porous silica particles for controlled release of drugs : doktorska disertacija. Ljubljana: 2013. [COBISS.SI-ID 267996416] 12. PIRNAT, Klemen. Litijevi ionski akumulatorji na osnovi redoks aktivnih organskih molekul : Klemen Pirnat. Ljubljana: 2013. [COBISS.SI-ID 266454528] 13. KOVAČ, Simon. Vpliv različnih kontaktnih površin kolčnih endoprotez (kovina-polietilen in kovina-kovina) na srednjeročne rezultate kliničnih in radioloških analiz : [doktorska disertacija]. [Ankaran: S. Kovač, 2012]. [COBISS.SI-ID 265093376] 14. MAVER, Uroš. Funkcionalizacija površin za razvoj dostavnih sistemov učinkovin za ciljano zdravljenje = Functionalization of surfaces for the development of drug delivery systems for targeted therapy : doktorska disertacija. Ljubljana: [COBISS.SI-ID 257914112] 15. ERJAVEC, Boštjan. Nanostrukturirani kompoziti za litijeve ionske akumulatorje visokih moči : doktorska disertacija. Ljubljana: [B. Erjavec], 2011. [COBISS.SI-ID 4646682] 16. MOŠKON, Jože. Elektrokemijski mehanizmi v pozitivnih elektrodah za litij ionske baterije : doktorska disertacija. Ljubljana: [J. Moškon], 2010. [COBISS.SI-ID 1090399] 17. FIGURSKA, Małgorzata. Mechanical, histological and biological analysis of artificial joint loosening : doctoral thesis = [Rozprawa doktorska]. Wrocław:, 2010. [COBISS.SI-ID 23500071] 18. HRIBERNIK, Silvo. Študij predobdelave in oplaščanja regeneriranih celuloznih vlaken z nano delci : doktorska disertacija. [Maribor: S. Hribernik], 2010. VII, 171 f., ilustr., preglednice. http://dkum.uni-
--	--	---

		mb.si/Dokument.php?id=16267. [COBISS.SI-ID 252288256]	
	Šifra	D.09 Mentorstvo doktorandom	
	Objavljeno v	[N. Kovačević]; 2013; VIII, VI, 85 str.; Avtorji / Authors: Kovačević Nataša	
	Tipologija	2.08 Doktorska disertacija	
2.	COBISS ID	5252122	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Vodenje mednarodnih projektov
		ANG	Leadership of international projects
	Opis	SLO	R. Dominko je koordinator EU OP7 projekta EUROLIS (partnerji MPI Potsdam, Volvo, Renault, Saft itd, vrednost projekta: 3.7 mio EUR) R. Dominko je koordinator EU Horizont2020 projekta HELIS (partnerji MPI Potsdam, Volvo, Saft itd, vrednost projekta: 8 mio EUR) I. Milošev je vodila temeljni projekti (J1-4136, 2011-2014), ERA-MNT projekt (Surfuncti) in bilateralni projekti (SLI-ARG) kot slovenski coordinator. M. Gabersček je slovenski koordinator EU OP7 projekta Euroliion M. Gabersček je vodil Center odličnosti CO NOT.
		ANG	R. Dominko is coordinator of EU FP7 project EUROLIS (partners MPI Potsdam, Volvo, Renault, Saft etc, project value: 3.7 mio EUR) R. Dominko is coordinator of EU Horizon2020 project HELIS (partners MPI Potsdam, Volvo, Renault, Saft etc, project value: 8 mio EUR) I. Milošev was the project leader for one basic project (J1-4136). For ERA-NET project (Surfuncti) and bilateral project (SLO-ARG) she was the project leader at the Slovenian side. M. Gaberscek is the Slovene coordinator of a FP7 project EUROLIION. M Gaberscek has led Center of Excellence CO NOT (10 million EUR)
	Šifra	D.01 Vodenje/koordiniranje (mednarodnih in domačih) projektov	
	Objavljeno v	TV Slovenija 1; 2013; Avtorji / Authors: Dominko Robert	
	Tipologija	3.11 Radijski ali TV dogodek	
3.	COBISS ID	4947738	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Patenti
		ANG	Patents
	Opis	SLO	Programska skupina je od leta 2009 prijavila 14 patentov (4 mednarodne), 5 je že bilo odobrenih: 1. BELE, Marjan, DOMINKO, Robert, PIVKO, Maja, GABERŠČEK, Miran. Dvostopenjska sintezna metoda za pripravo kompozitov insercijskih aktivnih spojin za litijeve ionske akumulatorje : patent : SI 23488 (A), 2012-03-30. Ljubljana: Urad Republike Slovenije za intelektualno lastnino, 2012. [COBISS.SI-ID 4947738] 2. BELE, Marjan, DOMINKO, Robert, VIDAL-ABARCA GARRIDO, Candela, PIVKO, Maja, GABERŠČEK, Miran. Katodni materiali za litijeve ionske akumulatorje na osnovi litijiranih vanadij oksidnih spojin : patent : SI 23155 (A), 2011-03-31. Ljubljana: Urad Republike Slovenije za intelektualno lastnino, 2011. [COBISS.SI-ID 4258074] 3. GENORIO, Boštjan, PIRNAT, Klemen, DOMINKO, Robert, GABERŠČEK, Miran. Elektrodni kompozit na osnovi redoks aktivnih organskih molekul kot elektrodni material v litijevih ionskih akumulatorjih : patent : SI 23087 (A), 2010-12-31. Ljubljana: Urad Republike Slovenije za intelektualno lastnino, 2010. [COBISS.SI-ID 36284421] 4. UKMAR GODEC, Tina, GODEC, Aljaž, MAVER, Uroš, GENORIO, Boštjan, BELE, Marjan, PLANINŠEK, Odon, GABERŠČEK, Miran, JAMNIK, Janko. Sterično stabilizirana disperzija hibridnega anorgansko-organskega materiala v okolju kot pripravek za zaščito pred UV žarki ter postopek priprave : patent : SI 22859 (A), 2010-03-31. Ljubljana: Urad RS za

		intelektualno lastnino, 2010. [COBISS.SI-ID 4272666] 5. KÜZMA, Mirjana, DOMINKO, Robert, BELE, Marjan, GABERŠČEK, Miran, JAMNIK, Janko. Titanati prehodnih kovin kot materiali za katodo v litijevih akumulatorjih : SI 22771 (A), 2009-10-30. Ljubljana: Urad Republike Slovenije za intelektualno lastnino, 2009. [COBISS.SI-ID 4196122]	
	ANG	Since 2009 the programme group has applied for 14 patents (4 international) of which 5 have already been granted: 1. BELE, Marjan, DOMINKO, Robert, PIVKO, Maja, GABERŠČEK, Miran. Dvostopenjska sintezna metoda za pripravo kompozitov insercijskih aktivnih spojin za litijeve ionske akumulatorje : patent : SI 23488 (A), 2012-03-30. Ljubljana: Urad Republike Slovenije za intelektualno lastnino, 2012. [COBISS.SI-ID 4947738] 2. BELE, Marjan, DOMINKO, Robert, VIDAL-ABARCA GARRIDO, Candela, PIVKO, Maja, GABERŠČEK, Miran. Katodni materiali za litijeve ionske akumulatorje na osnovi litijiranih vanadij oksidnih spojin : patent : SI 23155 (A), 2011-03-31. Ljubljana: Urad Republike Slovenije za intelektualno lastnino, 2011. [COBISS.SI-ID 4258074] 3. GENORIO, Boštjan, PIRNAT, Klemen, DOMINKO, Robert, GABERŠČEK, Miran. Elektrodni kompozit na osnovi redoks aktivnih organskih molekul kot elektrodni material v litijevih ionskih akumulatorjih : patent : SI 23087 (A), 2010-12-31. Ljubljana: Urad Republike Slovenije za intelektualno lastnino, 2010. [COBISS.SI-ID 36284421] 4. UKMAR GODEC, Tina, GODEC, Aljaž, MAVER, Uroš, GENORIO, Boštjan, BELE, Marjan, PLANINŠEK, Odon, GABERŠČEK, Miran, JAMNIK, Janko. Sterično stabilizirana disperzija hibridnega anorgansko-organskega materiala v okolju kot pripravek za zaščito pred UV žarki ter postopek priprave : patent : SI 22859 (A), 2010-03-31. Ljubljana: Urad RS za intelektualno lastnino, 2010. [COBISS.SI-ID 4272666] 5. KÜZMA, Mirjana, DOMINKO, Robert, BELE, Marjan, GABERŠČEK, Miran, JAMNIK, Janko. Titanati prehodnih kovin kot materiali za katodo v litijevih akumulatorjih : SI 22771 (A), 2009-10-30. Ljubljana: Urad Republike Slovenije za intelektualno lastnino, 2009. [COBISS.SI-ID 4196122]	
	Šifra	F.33 Patent v Sloveniji	
	Objavljeno v	Urad Republike Slovenije za intelektualno lastnino; 2012; 13 str., [2] str. pril.; Avtorji / Authors: Bele Marjan, Dominko Robert, Pivko Maja, Gaberšček Miran	
	Tipologija	2.24 Patent	
4.	COBISS ID	25178919	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Vabljen predavanja
		ANG	Invited lectures
	Opis	SLO	Člani programske skupine so od leta 2009 imeli več kot 40 vabljenih predavanj na mednarodnih konferencah in tujih univerzah (glej COBISS)
		ANG	Since 2009 Members of programme have had more than 40 invited lectures at international symposia and at foreign universities (see COBISS)
	Šifra	B.04 Vabljen predavanje	
	Objavljeno v	ECS; Meeting abstracts; 2011; Avtorji / Authors: Milošev Ingrid, Cör Andrej	
5.	Tipologija	1.10 Objavljeni povzetek znanstvenega prispevka na konferenci (vabljen predavanje)	
	COBISS ID	269380864	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Nagrade
		ANG	Awards
		1. M. Gaberšček je prejel Zoisovo nagrado za vrhunske dosežke na področj	

Opis	SLO	materialov. 2. M. Gaberšček, R. Dominko in A. Kokalj so vsak posebej prejeli Preglovo nagrado za izjemno odkritje na področju kemije oziroma sorodnih ved. 3. Skupina sodelavcev I. Milošev, Peter Rodič, Barbara Kapun in Jernej Iskra je za prispevek "Corrosion protection with hybrid sol-gel ocoatings: TMZ coating – the most recent approach of protection" osvojila nagrado za inovacijo z največjim komercialnim potencialom na Šesti mednarodni konferenci o prenosu tehnologij in Dnevu inovativnosti Gospodarske zbornice Slovenije 4. a) dr. Sebastijan Peljhan je prejel Nagrado Maksa Samca za doktorsko disertacijo s področja kemije za leto 2013 na Fakulteti za kemijo in kemijsko tehnologijo Univerze v Ljubljani. Nagrado je prejel za disertacijo z naslovom »Simulacije mehanizma inhibicije benzotriazola kot inhibitorja korozije bakra v kloridnem mediju«, ki jo je pripravil na Odseku za fizikalno in organsko kemijo Instituta »Jožef Stefan« pod mentorstvom dr. A. Kokalja. b) Enako nagrado je za področje kemijskega inženirstva prejel dr. Andrej Žnidaršič (mentor: Miran Gaberšček) 5. Tina Ukmar je prejela univerzitetno Prešernovo nagrado za izvrstno diplomsko delo. Somentor je bil Miran Gaberšček.
	ANG	1. M. Gaberšček was awarded Zois award (the highest national award) for achievements in the field of materials science. 2. M. Gaberšček, R. Dominko and A. Kokalj were separately awarded the Pregl award for excellent achievements in the field of chemistry or related scientific field. 3. I. Milošev, Peter Rodič, Barbara Kapun and Jernej Iskra were awarded the "Best innovation with business proposition" for the contribution ""Corrosion protection with hybrid sol-gel ocoatings: TMZ coating – the most recent approach of protection"" at the 6th Technology Transfer Conference and Innovation Day of the Chamber of Commerce. 4. a) dr. Sebastijan Peljhan was awarded the Maks Samec award for chemistry at the Faculty of Chemistry and Chemical Technology University of Ljubljana. Award was given for the dissertation entitled "Simulations of corrosion inhibition mechanisms of benzotriazole as copper corrosion inhibitor in chloride media" supervised by dr. A. Kokalj from the Department of Physical and Organic Chemistry of the Jožef Stefan Institute. b) The same award but in the field of chemical engineering was awarded to dr. Andrej Žnidaršič (mentor: Miran Gaberšček). 5. Tina Ukmar received a University "Presern award" for excellent diploma Thesis. Co-mentor was M. Gaberscek.
	Šifra	E.01 Domače nagrade
Objavljeno v		[A. Žnidaršič]; 2013; 124 str.; Avtorji / Authors: Žnidaršič Andrej
Tipologija		2.08 Doktorska disertacija

8. Drugi pomembni rezultati programske skupine²

-

9. Pomen raziskovalnih rezultatov programske skupine⁸

9.1. Pomen za razvoj znanosti⁹

SLO

Predpogoj za pripravo materialov z boljšo funkcionalnostjo (oziroma multifunkcionalnostjo), z višjo stopnjo zanesljivosti ter izboljšano trajnostjo je obvladovanje arhitekture materialov na nanoskopskem nivoju. Med izvajanjem programa smo bili priča zelo velikemu napredku pri izdelavi dobro definiranih nanoarhitektur, in to v primeru precej različnih tipih materialov, kot so: materiali za energetski sektor, materiali za zdravje in drugi napredni materiali za trajnostni razvoj. Pokazali smo, da obvladujemo nanoarhitekturo na majhnih velikostnih skalah, denimo v primeru različnih nanobjektov, medfaz ali površin reda velikosti nekaj kvadratnih mikrometrov ter kompozitov na mikro in nanoskali. Na primer na področju sinteze smo sistematično uporabljali nove pristope, kjer smo potek reakcij spremljali z uporabo različnih in situ tehnik. Podobno smo uporabljali različne kombinacije tehnik za spremljanje obnašanja materialov v določenem časovnem obdobju oziroma za spremljanje njihove funkcionalnosti pri različnih zunanjih pogojih. Ob tem smo uvedli več novih ex- oziroma in-situ tehnik za spremljanje strukturnih, morfoloških in kompozicijskih sprememb. V vseh navedenih primerih smo pogosto uporabili tudi različne računske metode (od atomističnega do kontinuum nivoja). Na osnovi takšnega pristopa smo objavili več člankov v najprestižnejših revijah, kot so Nature Materials, Angewandte Chemie, Advanced Material, JACS, Physical Review Letters, ACS Nano ipd. Visoke standarde raziskav smo, med drugim, vzdrževali tudi tako, da smo sodelovali z najuglednejšimi raziskovalnimi inštitucijami v Evropi, kot so 3 Max-Planck inštituti (Stuttgart, Potsdam, Dusseldorf), Univerza v Uppsali, Fraunhofer inštitut, CEA in CNRS v Franciji, TU Delft pa tudi z drugimi inštituti po svetu (predvsem Argonne National Lab, Chicago). Sodelovanje je obsegalo vse aspekte, od živahne izmenjave študentov (v obe smeri) do skupne udeležbe v večjih EU ali pa bilateralnih projektih. Osnovna znanja so pogosto prehajala v izbrane industrijsko pomembne aplikacije, bodisi v Sloveniji ali pa v mednarodnem prostoru. Trenutno imamo denimo 6 večjih neposrednih pogodb z industrijo, s 13 partnerji pa sodelujemo pri manjših raziskavah tekoče problematike, povezane z obstoječimi industrijskimi izdelki.

ANG

Mastering the materials architecture at nanoscopic level is a precondition for preparation of materials with better functionality (or multifunctionality), higher reliability, longer durability etc. Great advancements have been achieved in the areas of materials for energy sector, materials for health and other advanced sustainable materials pursued in this programme. In terms of structure, morphology and compositional features good control of materials nanoarchitecture has been achieved on selected nanoobjects, interfaces or surfaces of small surface areas (on the order of several micrometers or less), composites etc. More specifically, in the field of synthesis, we have constantly been using new approaches coupled with extensive use of in-situ monitoring of processes taking place during the synthesis. Similarly, to improve the understanding of materials behaviour (functionality), we have introduced novel in-situ and ex-situ techniques for investigation of morphological, structural and compositional changes under given conditions. Finally, many phenomena have been explained using theoretical modeling on different levels – from atomistic to continuum. This approach has already led to high quality results published in top journal like Nature Materials, Angewandte Chemie, Advanced Material, JACS, Physical Review Letters, ACS Nano etc. Further enrichment of our core approaches was achieved by cooperation with most established EU research institution such as three Max-Planck Institutes (Stuttgart, Potsdam, Dusseldorf), University of Uppsala, Fraunhofer Institute, CEA and CNRS in France, TU Delft but also with Argonne National Lab and others. The cooperation has ranged from vigorous exchange of students (in both directions) to participation in major EU projects, bilateral cooperations etc. The basic knowledge has been regularly transferred to applications via cooperation with international and national companies.

9.2. Pomen za razvoj Slovenije¹⁰

SLO

Program se je osredotočal na robne tekoče probleme v znanosti o materialih. Še posebej se osredotočal na materiale za energetski sektor in za zdravje. V programske aktivnosti smo uspešno vključevali različne industrijske partnerje s tega področja: Mebius, Inea, Domel, TEŠ,

Petrol, Holding slovenske elektrarne, Silkem, Cinkarna, Iskra sistemi in še nekatere druge predvsem s področja avtomobilske industrije. Kemijski inštitut je pravzaprav 4 leta koordiniral konzorcij, v katerega so vključena omenjena podjetja (Center odličnosti nizkoogljične tehnologije, CO NOT). Znotraj konzorcija so programske aktivnosti že doživele nekatere tržne aplikacije, ki so delno razvidne iz seznama patentov v sistemu Sicris.

Poleg litijevih in vodikovih tehnologij smo s slovenskimi partnerji razvijali tudi materiale za barve (Helios, Jub), materiale za prirejeno sproščanje zdravil (Lek), na področju implantatov pa smo sodelovali celo z eno od slovenskih bolnišnic (Valdoltra).

Nadalje se je program izrazito posveča tudi vzgoji mladih inženirjev in raziskovalcev. Čeprav niti Kemijski inštitut niti IJS nista izobraževalni ustanovi, je v programske aktivnosti nenehno vključenih med 20 in 25 mladih raziskovalcev pa tudi raziskovalcev iz industrije/gospodarstva. Diplome jim ob koncu študija podelijo naši partnerji (Univerza v Ljubljani, MPS, UNG ipd). Nenazadnje je potrebno omeniti naše intenzivno vključevanje v raziskave v evropskem prostoru. Vključeni smo bili v številne projekte, skrbimo za redno izmenjavo študentov med našimi inštitucijami in tujino, v program vključujemo sodelavce iz industrijskih razvojnih oddelkov.

ANG

The programme has been dealing with selected edge current problems in the area of materials science, in particular materials for energy and health sectors. The programme activities have been strongly connected with 10 Slovene companies active in the field of hydrogen or lithium technologies: Mebius, Inea, Domel, Thermal power plant Šoštanj, Holding of Slovene Power Plants, Petrol, Silkem, Cinkarna, Iskra Systems and a couple of other working in automotive sector. NIC in fact has led a consortium including these companies (Centre of Excellence for Low Carbon Technologies). Some of developed materials have already been included in selected products of these companies. It is estimated that in the coming years the market will further open for innovative technologies in the field of sustainable/low carbon technologies. Thus, we see the programme activities as strongly oriented in the future giving our companies a chance to become leaders in selected niches of most advanced technologies.

Besides in the fields of lithium and hydrogen technologies we have also amply cooperated with Slovene paint industry (Helios, Jub), pharmaceutical industry (Lek) and even hospitals (Valdoltra).

Furthermore, our programme has been very much focused on education of young engineers and scientist. Although our Institute is NOT an educational institution, there are about 20-25 young people regularly included in the programme activities on various levels of education. The degree is then granted by a partner educational institution, such as University of Ljubljana, International school Jozef Stefan etc. Additionally, we occasionally train people coming directly from an industrial partner to solve particular burning problem. Thus, the programme certainly contributes to better and focused education of young people and people working in industrial R&D departments.

Finally, we need to mention our wider embedment into EU area. We have many bilateral and project-based cooperations involving both EU industry and young researchers from various countries. Every year we accept up to 5 students to work on particular problems in our labs. Of course, the exchange works in both directions.

10. Zaključena mentorstva članov programske skupine pri vzgoji kadrov v obdobju 1.1.2009-31.12.2014¹¹

10.1. Diplome¹²

vrsta usposabljanja	število diplom
bolonjski program - I. stopnja	7
bolonjski program - II. stopnja	5
univerzitetni (stari) program	29

10.2. Magisterij znanosti in doktorat znanosti¹³

Šifra	Ime in priimek	Mag.	Dr.	MR	
-------	----------------	------	-----	----	--

raziskovalca					
30961	Matevž Topolovec	☐	☒	☐	
30842	Andrej Žnidaršič	☐	☒	☐	
31233	Nataša Kovačević	☐	☒	☐	
29487	Aljaž Godec	☐	☒	☐	
35621	Remi Khatib	☐	☒	☐	
29537	Sebastijan Peljhan	☐	☒	☐	
0	SIRISOPANAPORN Chutc	☐	☒	☐	
0	Malgorzata Figurska	☐	☒	☐	
27558	Silvo Hribernik	☐	☒	☐	
28477	Matjaž Finšgar	☐	☒	☐	
26506	Mirjana Kuzma	☐	☒	☐	
25788	Boštjan Genorio	☐	☒	☐	
32104	Peter Nadrah	☐	☒	☐	
30843	Klemen Pirnat	☐	☒	☐	
23526	Simon Kovač	☐	☒	☐	
30850	Uroš Maver	☐	☒	☐	
28564	Boštjan Erjavec	☐	☒	☐	
28561	Jože Moškon	☐	☒	☐	
33208	Žiga Velišček	☐	☒	☐	
0	Robin Amisse	☐	☒	☐	

Legenda:

Mag. - Znanstveni magisterij**Dr.** - Doktorat znanosti**MR** - mladi raziskovalec**11. Pretok mladih raziskovalcev – zaposlitev po zaključenem usposabljanju¹⁴**

Šifra raziskovalca	Ime in priimek	Mag.	Dr.	Zaposlitev	
30961	Matevž Topolovec	☐	☒	A - raziskovalni zavodi	
30842	Andrej Žnidaršič	☐	☒	E - Tujina	
31233	Nataša Kovačević	☐	☒	A - raziskovalni zavodi	
29487	Aljaž Godec	☐	☒	E - Tujina	
35621	Remi Khatib	☐	☒	E - Tujina	
29537	Sebastijan Peljhan	☐	☒	A - raziskovalni zavodi	
28477	Matjaž Finšgar	☐	☒	A - raziskovalni zavodi	
26506	Mirjana Kuzma	☐	☒	E - Tujina	
25788	Boštjan Genorio	☐	☒	E - Tujina	
32104	Peter Nadrah	☐	☒	A - raziskovalni zavodi	
30843	Klemen Pirnat	☐	☒	A - raziskovalni zavodi	

23526	Simon Kovač	☐	☒	A - raziskovalni zavodi	
30850	Uroš Maver	☐	☒	A - raziskovalni zavodi	
28564	Boštjan Erjavec	☐	☒	A - raziskovalni zavodi	
28561	Jože Moškon	☐	☒	A - raziskovalni zavodi	
27558	Silvo Hribernik	☐	☒	D - Javni zavod	
33208	Žiga Velišček	☐	☒	F - Drugo	

Legenda zaposlitev:

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

12.Vključenost raziskovalcev iz podjetij in gostovanje raziskovalcev, podoktorandov ter študentov iz tujine, daljše od enega meseca, v obdobju 1.1.2009-31.12.2014

Šifra raziskovalca	Ime in priimek	Sodelovanje v programski skupini	Število mesecev	
35621	Remi Khatib	C - študent – doktorand	16	
0	Robin Amisse	C - študent – doktorand	18	
0	SIRISOPANAPORN Chutc	C - študent – doktorand	17	
31942	Viktor Napast	A - raziskovalec/strokovnjak	15	
0	Jean-Marcel ATEBA MBA	C - študent – doktorand	6	
0	Candela VIDAL-ABARCA	C - študent – doktorand	6	
0	Jeremy COME	C - študent – doktorand	6	
0	Christian Masquelier	B - uveljavljeni raziskovalec	3	

Legenda sodelovanja v programski skupini:

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

13.Vključevanje v raziskovalne programe Evropske unije in v druge mednarodne raziskovalne in razvojne programe ter drugo mednarodno sodelovanje v obdobju 1.1.2009-31.12.2014¹⁵

SLO

1. MNT ERANET, SvenSloBatt, Vodja: R. Dominko (2007-2009)
2. MNT ERA NET II, SURFUNCTI: slovenski koordinator I. Milošev (2009- 2013)
3. MAT ERA NET, RHSI-DCL-NanoComp: slovenski koordinator I. Milošev (2010 - 2013)
4. ESRR "Transregional network for innovation and technology transfer to improve health care« ("Transregionalno omrežje za inovacijo in prenos tehnološkega znanja za izboljšanje zdravstva"), akronim Trans2Care,2007-2013, I. Milošev

5. FP7: EuroLiion: High energy density Li-ion cells for traction; (1.2.2011- 31.1.2015); Contract No. 265368; slovenski koordinator Miran Gaberšček
6. NANOBIPHARMACEUTICS, FP6-2004-NMP, M. Bele (2006-2010)
7. FP7 EUROLIS: Advanced European lithium sulphur cells for automotive applications; 1.10.2012-30.9.2016, Contr. No.: 314515; Projekt v vrednosti skoraj 4 milijone koordinira član projektne skupine R. Dominko
8. Bilateralni projekt BI-HR/ 10-11: nosilka I. Milošev (2010 - 2011)
9. Bilateralni projekt BI-SR/ 10-11: nosilka I. Milošev (2010 - 2011)
10. Bilateralni projekt BI-USA/ 09-10: nosilka I. Milošev (2009 - 2010)
11. CEA bilateralni projekt med KI in CEA Grenoble, Francija (oktober 2009 - september 2011) (odgovorna nosilca Robert Dominko in Sebastien Patoux).
12. bilateralni slovensko italijanski projekt: A. Kokalj (2006-2009)
13. Bilateralni projekt med Slovenijo in Češko: Ionske tekočine za litijeve baterije (nosilec: Robert Dominko, 2008-2009).
14. ALISTORE-ERI, Evropska raziskovalni inštitut, 1.1.2009 nastal iz istoimenske mreža odličnosti s področja Li baterij, Miran Gaberšček je vodja tematskega sklopa: Theory (2009-), Robert Dominko je vodja tematskega sklopa Nanopositives (2009-)
15. Center odličnosti nizkoogljicne tehnologije CO NOT, 2009-2014, direktor: M. Gaberšček (skupna vrednost 10 milijonov EUR)

14.Vključenost v projekte za uporabnike, ki so v obdobju trajanja raziskovalnega programa (1.1.2009–31.12.2014) potekali izven financiranja ARRS¹⁶

SLO

1. Industrijski projekt z RC ENEM za izvajanje raziskav po naročilu partnerja; vodja: M. Gaberšček (oktober-december 2012).
2. Industrijski projekt: »Testing CIs for metals in different media, with emphasis on acidic media and Methane Sulfonic Acid (MSA)«; Dr. Matjaž Finšgar/ Dr. Ingrid Milošev, 1.1. 2012 do 30.6. 2012, Partner: BASF SE, Carl-Bosch-Strasse 38, 67056 Ludwigshafen, Nemčija 2.
3. Storitve elektronske mikroskopije za 10 industrijskih partnerjev (izvajanje skozi celotni program, 22 naročnikov iz industrije in akademije)
4. Iskra TELA d.d., PE Baterije Zmaj, Šentvid pri Stični, optimizacija baterijskih elektrod (neposredna pogodba)
5. Cinkarna Celje, razvoj materialov na osnovi titanovega oksida (neposredna pogodba)
6. Iskra Evtoelektrika, d.d. raziskave izbranih komponent elektromotorja (neposredna pogodba)
7. HELIOS Domžale d.d., okolju prijazni premazi (neposredna pogodba)
8. Projekt s tematiko razvoja gorivnih celic, financer: MORS, vodja na KI M. Gaberšček, financiran 2011-2012(celotna vrednost projekta 950,000
9. Honda starting grant, 2012-2013 (30.000 EUR)

10. Honda advanced grant, 2013-2014 (150.000 EUR)

15. Ocena tehnološke zrelosti rezultatov raziskovalnega programa in možnosti za njihovo implementacijo v praksi (točka ni namenjena raziskovalnim programom s področij humanističnih ved)¹⁷

SLO

Rezultati programa na področju baterijskih raziskav ponujajo možnost implementacije dveh materialov v baterije. Potrebna je razširitev zmogljivosti na polindustrijsko skalo in testiranje večjih količin vzorcev. Zato je potreben vložek v polindustrijsko linijo, katere vrednost znaša okoli 1 milijon EUR.

16. 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	☒ DA ☐ NE
potrebni finančni vložek	100.000.000 EUR
ocena potrebne infrastrukture in opreme ¹⁸	Znotraj predlagane vsote

17. Izjemni dosežek v letu 2014¹⁹

17.1. Izjemni znanstveni dosežek

Glej priponko

17.2. Izjemni družbeno-ekonomski dosežek

Člani programske skupine so podpisali neposredni industrijski projekt s Hondo (japonski avtomobilski proizvajalec) o sodelovanju na področju razvoja novih akumulatorjev za električne avtomobile v letih 2015 in 2016.

C. IZJAVE

Podpisani izjavljam/o, da:

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

Podpisi:

*zastopnik oz. pooblaščen oseba
matične RO (JRO in/ali RO s
koncesijo):*

Kemijski inštitut

in

vodja raziskovalnega programa:

Miran Gabersček

ŽIG

Kraj in datum:

Ljubljana

15.3.2015

Oznaka poročila: ARRS-RPROG-ZP-2015/170

¹ 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](#)

² 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. V primeru odobrenega povečanja obsega financiranja raziskovalnega programa v letu 2014 mora poročilo o realizaciji programa dela zajemati predložen program dela ob prijavi in predložen dopolnjen program dela v letu 2014. Največ 12.000 znakov vključno s presledki (približno dve strani, velikosti pisave 11). [Nazaj](#)

³ Realizacija raziskovalne hipoteze. Največ 3.000 znakov vključno s presledki (približno pol strani, velikosti pisave 11). [Nazaj](#)

⁴ 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, navedite: "Ni bilo sprememb.". Največ 6.000 znakov vključno s presledki (približno ena stran, velikosti pisave 11). [Nazaj](#)

⁵ Navedite znanstvene dosežke (največ pet), ki so nastali v okviru izvajanja raziskovalnega programa. Raziskovalni dosežek iz obdobja izvajanja programa 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](#)

⁶ Navedite družbeno-ekonomske dosežke (največ pet), ki so nastali v okviru izvajanja raziskovalnega programa. Družbeno-ekonomski dosežek iz obdobja izvajanja programa vpišete tako, da izpolnite COBISS kodo dosežka – sistem nato sam izpolni naslov objave, naziv, IF in srednjo vrednost revije, naziv FOS področja ter podatek, ali je dosežek uvrščen v A'' ali A'.

Družbeno-ekonomski dosežek je po svoji strukturi drugačen kot znanstveni dosežek. Povzetek znanstvenega dosežka je praviloma povzetek bibliografske enote (članka, knjige), v kateri je dosežek objavljen.

Povzetek družbeno-ekonomskega dosežka praviloma ni povzetek bibliografske enote, ki ta dosežek dokumentira, ker je dosežek sklop več rezultatov raziskovanja, ki je lahko dokumentiran v različnih bibliografskih enotah. COBISS ID zato ni enoznačen, izjemoma pa ga lahko tudi ni (npr. prehod mlajših sodelavcev v gospodarstvo na pomembnih raziskovalnih nalogah, ali ustanovitev podjetja kot rezultat programa ... - v obeh primerih ni COBISS ID). [Nazaj](#)

⁷ Navedite rezultate raziskovalnega programa iz obdobja izvajanja programa v primeru, da katerega od rezultatov ni mogoče navesti v točkah 6 in 7 (npr. ker se ga v sistemu COBISS ne vodi). Največ 2.000 znakov vključno s presledki (približno 1/3 strani, velikost pisave 11). [Nazaj](#)

⁸ Pomen raziskovalnih rezultatov za razvoj znanosti in za razvoj Slovenije bo objavljen na spletni strani: <http://www.sicris.si/> za posamezen program, ki je predmet poročanja. [Nazaj](#)

⁹ Največ 4.000 znakov vključno s presledki (približno 2/3 strani, velikost pisave 11). [Nazaj](#)

¹⁰ Največ 4.000 znakov vključno s presledki (približno 2/3 strani, velikost pisave 11). [Nazaj](#)

¹¹ Upoštevajo se le tiste diplome, magisteriji znanosti in doktorati znanosti (zaključene/i v obdobju 1.1.2009–31.12.2014), pri katerih so kot mentorji sodelovali člani programske skupine. [Nazaj](#)

¹² Vpišite število opravljenih diplom v času izvajanja raziskovalnega programa glede na vrsto usposabljanja. [Nazaj](#)

¹³ Vpišite šifro raziskovalca in/ali ime in priimek osebe, ki je v času izvajanja 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](#)

¹⁴ Za mlade raziskovalce, ki ste jih navedli v tabeli 11.2. točke (usposabljanje so uspešno zaključili v obdobju od 1.1.2009 do 31.12.2014), izberite oz. označite, kje so se zaposlili po zaključenem usposabljanju. [Nazaj](#)

¹⁵ Navedite naslove projektov in ime člana programske skupine, ki je bil vodja/koordinator navedenega projekta. Največ 6.000 znakov vključno s presledki (približno ena stran, velikosti pisave 11). [Nazaj](#)

¹⁶ 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 6.000 znakov vključno s presledki (približno ena stran, velikosti pisave 11). [Nazaj](#)

¹⁷ 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](#)

¹⁸ Največ 1.000 znakov vključno s presledki (približno 1/6 strani, velikost pisave 11) [Nazaj](#)

¹⁹ Navedite en izjemni znanstveni dosežek in/ali en izjemni družbeno-ekonomski dosežek raziskovalnega programa v letu 2014 (največ 1000 znakov, vključno s presledki, velikost pisave 11). Za dosežek pripravite diapozitiv, ki vsebuje sliko ali drugo slikovno gradivo v zvezi z izjemnim dosežkom (velikost pisave najmanj 16, približno pol strani) in opis izjemnega dosežka (velikost pisave 12, približno pol strani). Diapozitiv/-a priložite kot priponko/-i k temu poročilu. Vzorec diapozitiva je objavljen na spletni strani ARRS <http://www.arrs.gov.si/sl/gradivo/>, predstavitve dosežkov za pretekla leta pa so objavljena na spletni strani <http://www.arrs.gov.si/sl/analize/dosez/>. [Nazaj](#)

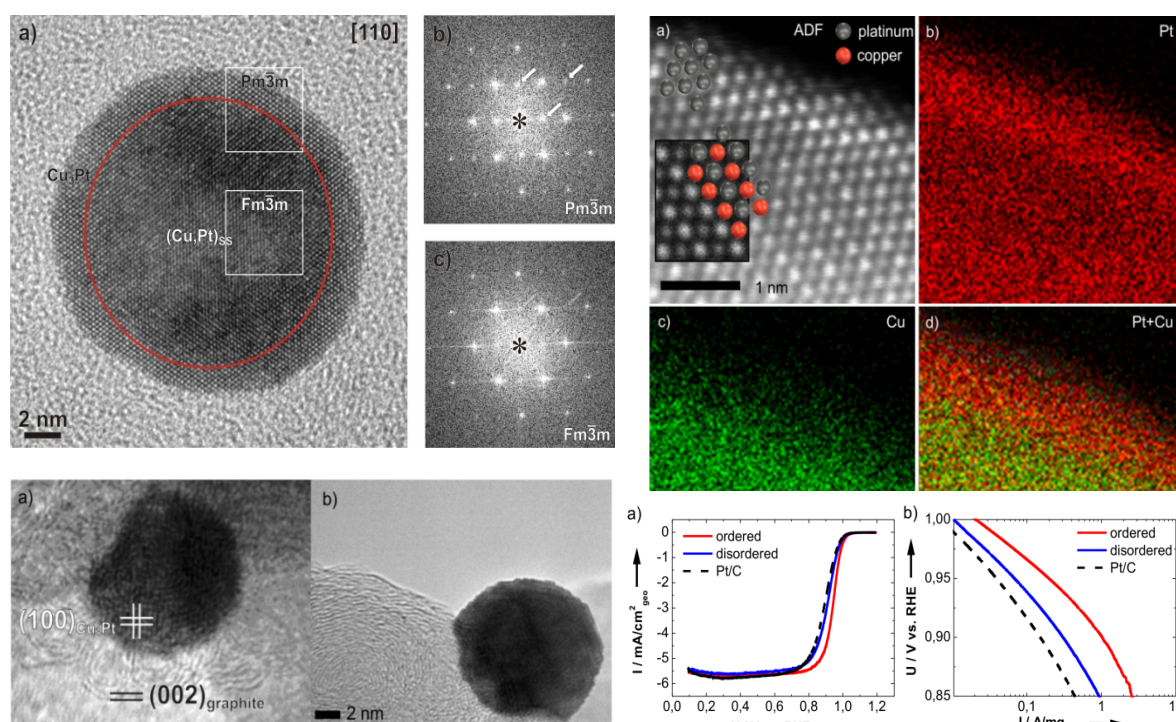
Obrazec: ARRS-RPROG-ZP/2015 v1.00b
05-34-0D-62-72-69-94-BF-10-01-85-2E-F7-72-FC-26-6A-EF-AA-82

Priloga 1

VEDA: Tehnika

Področje: 2.04 Materiali

Dosežek: Nov elektrokemijski katalizator za redukcijo kisika v PEM gorivnih celicah; Vir: M. Bele, P. Jovanovič, A. Pavlišič, B. Jozinovič, M. Zorko, A. Rečnik, E. Tchernychova, S. Hočevár, N. Hodnik, M. Gaberšček, *Chemical communications*, vol. 50, str. 13124-13126 (2014).



Izumili smo nov elektrokatalizator za redukcijo kisika v gorivnih celicah s protonsko izmenjalno membrano (PEM). Katalizator je osnovan na zlitini platine in bakra, pri čemer je bistveno, da ima zlitina urejeno kristalno strukturo, na njeni površini pa se izloči atomsko tanek sloj platine. Novi sintezni postopek (modificirana sol-gel sinteza) hkrati omogoča zelo tesen stik med nanodelci zlitine in ogljikovo podlago. Izkaže se, da specifična aktivnost novega katalizatorja ($0.7 \text{ mA/cm}^2_{\text{Pt}}$) za 350% presega plan ameriškega DOE (Department of energy) za leto 2017, masna pa za 250 %. Hkrati je katalizator glede na precejšnjo vsebnost bakra presenetljivo stabilen in prenese do 50,000 standardnih napetostnih ciklov pri sobni temperaturi. Izum čaka na podelitev evropskega, japonskega in ameriškega patenta (preizkusi so že bili uspešno izvedeni), objavili pa smo tudi članek v reviji *Chemical Communications* (faktor vpliva 6.7).