

Oznaka poročila: ARRS-RPROJ-ZP-2014/17



## ZAKLJUČNO POROČILO RAZISKOVALNEGA PROJEKTA

## A. PODATKI O RAZISKOVALNEM PROJEKTU

## 1. Osnovni podatki o raziskovalnem projektu

<b>Šifra projekta</b>	J2-4034
<b>Naslov projekta</b>	Raba zelenih virov energije: Novi funkcionalni nanomateriali na osnovi polioksometalatov in TiO <sub>2</sub> nanostruktur za pridobivanje vodika s katalitsko oksidacijo vode - NANOList
<b>Vodja projekta</b>	18274 Polona Umek
<b>Tip projekta</b>	J Temeljni projekt
<b>Obseg raziskovalnih ur</b>	5040
<b>Cenovni razred</b>	C
<b>Trajanje projekta</b>	07.2011 - 06.2013
<b>Nosilna raziskovalna organizacija</b>	106 Institut "Jožef Stefan"
<b>Raziskovalne organizacije - soizvajalke</b>	104 Kemijski inštitut
<b>Raziskovalno področje po šifrantu ARRS</b>	2 TEHNIKA 2.04 Materiali 2.04.01 Anorganski nekovinski materiali
<b>Družbeno-ekonomski cilj</b>	02. Okolje
<b>Raziskovalno področje po šifrantu FOS</b>	2 Tehniške in tehnološke vede 2.05 Materiali

## B. REZULTATI IN DOSEŽKI RAZISKOVALNEGA PROJEKTA

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

SLO

Znanstveno in tehnološko vodilo predlaganega projekta sta bila razvoj novega hibridnega nanomateriala na osnovi titanatnih oziroma TiO<sub>2</sub> nanostruktur in molekul polioksometalata (POM) in ocena katalitski lastnosti titanatnih in TiO<sub>2</sub> nanostruktur za kisl/bazično katalizo pri pretvorbah v organski kemiji in fotokataliz za razgradnjo organskih polutantov.

V **začetni fazi** smo uspešno sintetizirali 1D titanatne nanostrukture (nanopasove in nanocevke) in jih z ionsko izmenjavo pretvorili v protonirane titanate. V naslednji stopnji smo pod različnimi pogoji:

-termično na zraku ali reduktivni atmosferi amonijaka

-pod hidrotermalnimi pogoji

titanatne nanostrukture pretvarjali v 1D anataz.

Pokazalo se je, da pogoji pretvorbe ne vplivajo na morfologijo, po drugi strani pa močno vplivajo na specifično površino. Le ta se je pri pretvorbi pod hidrotermalnimi pogoji povečala za faktor 2. Povečalo se je tudi število OH skupin. V primeru pretvorbe v reduktivni atmosferi amonijaka pride do dopiranja z N, oziroma nitridacije. Vsebnost N je odvisna od temperature pretvorbe, časa in izhodnega materiala. Največjo vsebnost N so imeli produkti pri katerih smo kot reaktant uporabili protonirane titanatne nanostrukture.

V **razvojno raziskovalni fazi I** smo študirali katalitske lastnosti v kisl/bazični katalizi pri sobni temperature za dva tipa organskih reakcij:

-aldolna kondenzacija (reaktanti: benzaldehid in cikloheksanon)

-Manichova reakcija (reaktanti: benzaldehid, cikloheksanon, 4-bromoanilin)

Pokazalo se je da imajo titanatne nanocevke zaradi večje specifične površine boljše stopnjo pretvorbe reaktantov v produkte, pri pasovih pa v nekaterih primerih dosežemo bistveno boljšo selektivnost.

V **razvojno raziskovalni fazi II** smo študirali fotokatalitske lastnosti –modelna reakcija oksidacija izopropanola do acetona. Ugotovili smo, da imajo anatazne nanocevke zaradi večje specifične površine večjo aktivnost kot P25. V primeru anataznih nanopasov pa smo z načini pretvorbe, predvsem se je za zelo učinkovito pokazala kombinacija hidrotermalno-termično, bistveno izboljšali fotokemijsko aktivnost. Anataznim nanopasovom po površini dopiranim z N pa je fotokemijska aktivnost v primerjavi z nedopiranimi bistveno padla.

V **razvojno raziskovalni fazi III** smo z različnimi fizikalnimi tehnikami tehnikami (NEXAFS-TXM in EPR) študirali strukturo površine natrij titanatnih nanostruktur in s fizikalno-kemijskega vidika določiti mehanizem dopiranja z N. Z NEXAFS-TXM kombinacijo smo v primeru nanocevk določili strukturo površine, pokazali smo da ima površine različne tipe Ti in O atomov, in celo OH skupin. Te raziskave so bile močno podprte s teoretičnimi izračuni. V primeru možnega mehanizma pri dopiranju z N smo z NEXAFS in EPR tehnikov vzorcih z N dopiranih nanopasov dokazali prisotnost NO.

ANG

In the **starting phase**, sodium titanate 1D nanostructures (nanotubes and nanoribbons) were successfully synthesized and by ion exchange converted into protonated titanate nanostructures. Transformation of protonated titanate nanotubes and nanoribbons to  $TiO_2$  under different conditions was preformed:

-by thermal heating in air or a reductive ammonia atmosphere

-under hydrothermal conditions

It has been shown that transformations conditions strongly affect the nanoribbon surface. In the case of the protonated titanate nanoribbons transformed to anatase  $TiO_2$  under hydrothermal conditions specific surface area increased for a factor of 2 what was reflected in rougher nanoribbon surface. It was also noticed that the amount of OH groups was increased. When the transformation was performed in ammonia atmosphere doping with N took place – nitridation.

The N content strongly depended of the temperature of conversion and the exposure time. The highest content of N had products transformed from protonated titanate nanoribbons.

In the **research phase I** catalytic properties of sodium titanate and protonated titanate nanotubes/nanoribbons for acid/base catalyzed reaction in organic chemistry. Two model reactions was set up:

-aldol condensation (reactants: benzaldehyde and cyclohexanone)

-Manich reaction (reactants: benzaldehyde, cyclohexanone and 4-bromoanalin)

It was found out that the reaction in which titanate nanotubes were used as catalyst due to much higher specific surface area have better degree of conversion of reactants to products. However, in some cases when nanoribbons were used reaction resulted in a significantly greater selectivity.

In the **research phase II** photocatalytic properties of different TiO<sub>2</sub> nanostructures was studied by model reaction - oxidation of isopropanol. It was found that anatase nanotubes exhibit higher photocatalytic activity than Degussa P25 (standard materials used for comparison) due to increased specific surface. Photocatalytic activity of TiO<sub>2</sub> nanoribbons strongly depended on the transformation from protonated titanate nanoribbons. Combination of hydrothermal transformation followed by calcination post treatment proved to be very effective, while N doping of TiO<sub>2</sub> surface resulted a strong decrease of photocatalytic activity

Different physical techniques like a NEXAFS-TXM, EPR and HAADF-STEM were used to study structure, dopant location, and surface of sodium titanate and TiO<sub>2</sub> nanostructures in the **research phase III**. NEXAFS-TXM measurements supported with theoretic calculations revealed a complex surface structure of sodium titanate nanotubes. In the case o N doping NO was observed by two different techniques (NEXAFS-TXM and EPR). HAADF-STEM was used to study manganese migration in samples of protonated titanate nanotubes doped with Mn<sup>2+</sup> and calcinated at different temperatures.

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

Projekt je potekal v več fazah. V **začetni fazi** (sinteza in karakterizacija izhodnih materialov) smo se osredotočili na pripravo 1D TiO<sub>2</sub> nanostruktur iz protoniranih titanatnih nanocevk in nanopasov s formulo H<sub>2</sub>Ti<sub>3</sub>O<sub>7</sub> na več načinov:

(i) termično v reduktivni atmosferi amonijaka in na zraku

(ii) pod hidrotermalnimi pogoji v avtoklavu in mikrovalovnem reaktorju

Pri kalciniranju na zraku ali v toku NH<sub>3</sub> in temperaturah okoli 400 C se je protonirani titanatni nanopasovi (HTiNP) najprej pretvorili v TiO<sub>2</sub>-B nanopasove (NP) pri povišanju temperature na 600 C pa v anatazne NP pri čemer se je morfologija ohranila, specifična površina pa se je povišala za okoli 2% predvsem na račun nastanka por. Pri pretvorbi, ki je potekala na 600 C ne glede na čas kalciniranja produkt nikoli ni vseboval le anatazne faze. Pri krajših časih je bil produkt zmes TiO<sub>2</sub>-B in anatazne oblike TiO<sub>2</sub>, pri daljših časih pa anataza in rutila. Nasprotno pa je pri pretvorbi pod hidrotermalnimi pogoji nastal le anataz. V tem primeru se je povečala specifična površin in sicer za faktor 2. Površina nanopasov je postala bolj razbrazdana sama morfologija pa se je pri tej pretvorbi ohranila. V FTIR spektrih je intenziteta O-H vibracije pri okoli 3500-3300 cm<sup>-1</sup> bolj intenzivna kot pri produktih pretvorjenih termično v statični atmosferi zraka. Presenetljivo so rezultati z XPS tehniko so pokazali, da je v obeh primerih koncentracija OH skupin na specifično površino enaka.

Pri pretvorbi v NH<sub>3</sub> atmosferi smo predvidevali da bo na površini NP poteklo dopiranje oziroma substitucija površinskih OH skupin z NH<sub>2</sub>/NH<sub>3</sub> skupinami. Dejansko pa je pri pretvorbi v reduktivni atmosferi amonijaka prišlo do nitracije - nastanka nitrata. Z EPR karakterizacijsko tehniko smo v vzorcih NP pretvorjenih pri 600 C opazili prisotnost NO. Z višanjem temperature in časa pretvorbe se vsebnost N vzorcih NP narašča.

V primeru protiniranih titanatnih nanocevk (HTiNC) je pretvorba v anataz na zraku potekla med 350 in 400 C pri čemer se je morfologija ohranila. Razlog, da pretvorba v anataz pri NC poteka pri nižji temperaturi kot pri NP je v morfologiji (cevke so votle poleg tega pa imajo manjši premer 10 nm, nanopasovi pa 20-250 nm). Pri pretvorbi v mikrovalovnem reaktorju nanocevke razpadejo na nanometrijske delce s premerom 5 nm.

Zanimivo da pretvorba ne poteka v alkoholih kar nakazuje na aktivno vlogo vode pri pretvorbi protoniranega titanata v  $\text{TiO}_2$ .

V **razvojno raziskovalni fazi I** smo karakterizirali katalitske lastnosti v kisl/bazični kataliziranih reakcija pretvorbe organskih spojin. Modelni reakciji sta bili:

-aldolna kondenzacija, ki je kisl katalizirana reakcija. Reaktanta sta bila benzaldehid in cikloheksanon, kot katalizator pa smo uporabili protonirane titanatne nanocevkke in nanopasove.

-Manichova reakcija, je bazično katalizirana reakcija. Reaktantit so v tem primeru bili benzaldehid, cikloheksanon in 4-bromoanilin, kot katalizator pa smo uporabili natrij titanatne nanocevkke in nanopasove. Reakcije smo izvajali pri sobni temperatura in pod refluxom. Z uporaba katalizatorja tako pri eni kot pri drugi reakciji so reakcije z boljšimi izkoristki potekale pri sobni temperaturi. Izkoristki so bili bistveno boljši v primeru ko smo kot katalizator uporabili nanocevkke, po drugi strani, ko smo kot katalizator uporabili nanopasove je reakcija imela večjo selektivnost.

V **razvojno raziskovalni fazi II** smo se ukvarjali s površinsko funkcionalizacijo  $\text{TiO}_2$  nanostruktur s silani in karakterizacijo produktov. Osredotočili smo se na amino silane z dvema ali tremi izmenljivimi etoksi skupinami in s ciljem doseči enoplasnto funkcionalizacijo  $\text{TiO}_2$  površine nanostruktur. Reakcije smo izvajali v toluenu, etanolu in vodi. Razmerje med  $\text{TiO}_2$  nanostrukturami in silanom je bilo 100 mg  $\text{TiO}_2$ /0.3 mmol silana. Z majhno količino uporabljenega silana smo želeli le funkcionalizirati površinske OH skupine in istočasno preprečiti kondenzacijo silanov v  $\text{SiO}_2$ . Z XPS smo določili prisotnost N v funkcionaliziranih  $\text{TiO}_2$  nanostrukturah. Z TEM in SEM mikroskopijo pa smo na kalciniranih funkcionaliziranih  $\text{TiO}_2$  nanostrukturah pokazali da pri izbranih reakcijskih pogojih ni prišlo do kondenzacije in posledično do nastanka  $\text{SiO}_2$ . Reakcija je najbolje potekala v vodi, v toluenu pa je prišlo do kondenzacije molekul silana med seboj.

V **razvojno raziskovalni fazi III** smo z različni fizikalnimi tehnikami (spektroskopski in mikroskopskimi) študirali površino nanostruktur na nanoskali in interakcijo ionov dopantov z titanatn/ $\text{TiO}_2$  matriko. Navezali smo stik z dr. Carlo Bittencourt in dr. Petrom Guttmannom, ki sta omenjene materiale raziskala s kombinacijo spektroskopske in mikroskopske tehnike (NEXAFS in TXM):

-pri nanocevkah smo določili njihovo površinsko strukturo in v kombinaciji s teoretičnimi izračuni pokazali da imajo nanocevkke na površini 3 tipe Ti in 8 O atomov, in da je na 1 kisikov atom od 8 na eni strani vezan H atom.

-v primeru dopiranja z  $\text{Mn}^{2+}$  smo z NEXAFS-TXM kombinacijo določili oksidacijsko stanje mangana. Pomembno odkritje je, da  $\text{Mn}^{2+}$  pri sintezi natrij titanatnih nanostruktur ne spremeni oksidacijskega stanja. Pri kalciniranju na zraku pri katrem so se protonirani titanatni nanopasovi dopirani z  $\text{Mn}^{2+}$  pretvorili v  $\text{TiO}_2$  NP dopirane z manganom, mangan do 600 C ostane v oksidacijskem stanju 2+, nato pa se oksidira do stanja 3+ in 4+.

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

S področja pretvorb 1D protoniranih titanatnih nanostruktur v 1D  $\text{TiO}_2$  nanostrukture in funkcionalizacije površine 1D  $\text{TiO}_2$  nanostruktur s silani, sintezi dopiranih titanatnih nanostruktur in njihove pretvorbe v dopirane  $\text{TiO}_2$  nanostrukture smo dosegli vse zastavljene cilje.

S področja priprave kompozitov s POM pa smo v zaostanku. Razlog je bil, da smo bili v letu 2012 skoraj 9 mesecev brez ustreznega kemijskega laboratorija, saj so meritve pretoka zraka pokazale da v njih NI pretoka zraka. V teh 9 mesecih smo se ukvarjali z adaptacijo. V tem času smo se pri raziskavah usmerili na študij površine že pripravljenih materialov. Tako smo navezali stik z dr. Carlo Bittencourt, Univerza v Monsu in dr. Petrom Guttmannom (sinhrotron v Berlinu), kjer smo kot prvi na svetu dobili možnost

raziskav z kombinirano tehniko NEXAFS-TXM, ki je omogočila vpogled strukture površine naših materialov. To se je izkazalo kot zelo pomembno za nadaljevanje raziskav v smeri priprave kompozitov s POM.

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

V času trajanja projekta ni prišlo do spremembe projektne skupine.

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

		Znanstveni dosežek	
1.	COBISS ID	25317671	Vir: COBISS.SI
	Naslov	<i>SLO</i>	Spektroskopija s polariziranimi X-žarki v kombinaciji tehnik NEXAFS in TXM na nano-skali
		<i>ANG</i>	Nanoscale spectroscopy with polarized X-rays by NEXAFS-TXM
	Opis	<i>SLO</i>	Za karakterizacijo elektronskih stanj in lokalnih struktur v natrij titanatnih nanopasovih smo uporabili kombinacijo dveh tehnik in sicer NEXAFS in TXM. S tem so dosegli izredno visoko ločljivost meritev. Prednost istočasne kombinacije obeh tehnik (NEXAFS-TXM) se je pokazala predvsem v tem, da so meritve potekale na istem delu vzorca in da je serija posnetih slik zajela veliko število nanostruktur. Meritev je tako že vsebuje statistično informacijo. Pristop karakterizacije nanostruktur v kombinaciji z NEXAFS-TXM tehnikama odpira nove možnosti pri raziskavah materialov na nanoskali.
		<i>ANG</i>	Near-edge X-ray absorption spectroscopy (NEXAFS) is an essential analytical tool in material science. Combining NEXAFS with scanning transmission X-ray microscopy (STXM) adds spatial resolution and the possibility to study individual nanostructures. Here, we describe a full-field transmission X-ray microscope (TXM) that generates high resolution, large-area NEXAFS data with a collection rate two orders of magnitude faster than is possible with STXM. The TXM optical design combines a spectral resolution of E/DE5 13104 with a spatial resolution of 25 nm in a field of view of 15–20 mm and a data acquisition time of ~1 s. As an example, we present image stacks and polarization-dependent NEXAFS spectra from individual anisotropic sodium and protonated titanate nanoribbons. Our NEXAFS-TXM technique has the advantage that one image stack visualizes a large number of nanostructures and therefore already contains statistical information. This new high-resolution NEXAFS-TXM technique opens the way to advanced nanoscale science studies.
	Objavljeno v	Nature Pub. Group; Nature photonics; 2012; Vol. 6, no. 1; str. 25-29; Impact Factor: 27.254; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 1.857; A": 1; A': 1; WoS: SY, UB; Avtorji / Authors: Guttman Peter, Bittencourt Carla, Rehbein Stefan, Umek Polona, Ke Xiaoxing, Van Tendeloo Gustaaf, Ewels Christopher Paul, Schneider G.	
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek	
2.	COBISS ID	25878055	Vir: COBISS.SI
	Naslov	<i>SLO</i>	Lokalna koordinacija in oksidacijska stanja kobalta v natrij titanatnih nanopasovih
		<i>ANG</i>	Local coordination and valence states of cobalt in sodium titanate nanoribbons
		Natrij titanatne nanopasove (NaTiNP) dopirane z ioni Co <sup>2+</sup> smo sintetizirali pod hidrotermalnimi pogoji iz TiO <sub>2</sub> dopiranega z ioni Co <sup>2+</sup> . Karakterizacija z XRD tehniko je pokazala da imajo pasovi trititanatno strukturo ((Na,H)	

Opis	SLO	2Ti3O7). Preiskava sintetiziranega materiala s presežno elektronsko mikroskopijo je pokazala, da se na površini NaTiNP nahajajo nanodelci, ki v dolžino ne presegajo 15-20 nm. Nekateri od teh delcev imajo heksagonalno obliko. Delci s heksagonalno obliko imajo Co(OH) <sub>2</sub> strukturo (beta faza), kar se ujema tudi rezultati XRD in magnetnih meritev. Vsebnost kobalta v materialu določenega z XPS je 1.5 ut. %. XPS meritve so pokazale da se je del kobalta pod reakcijskimi pogoji oksidiral do oksidacijskega stanja 3+. Karakterizacija s HAADF-STEM tehniko v kombinaciji z EEL spektroskopijo je pokazala da je vsebnost kobalta v nanodelcih, ki se nahajajo na površini nanopasov bistveno večja kot v samih NaTiNP. Raziskave sintetiziranih NaTiNP z EPR tehniko so pokazale da Co <sup>2+</sup> zaseda oktahedralna mesta z rombično distorcijo v visoko spinskem stanju S = 3/2.	
	ANG	Co <sup>2+</sup> -doped sodium titanate nanoribbons (NaTiNRs) were grown under hydrothermal conditions from Co <sup>2+</sup> -doped TiO <sub>2</sub> . The obtained nanoribbons with lengths up to several μm were identified to be of trititanate structure ((Na,H) <sub>2</sub> Ti <sub>3</sub> O <sub>7</sub> ). Transmission electron microscopy disclosed nanoparticles, not exceeding 15–20 nm in length, as well as hexagonal nanoflakes located on the surface of the nanoribbons. Nanoflakes are most likely originating from Co(OH) <sub>2</sub> (beta phase) side product according to X-ray diffraction investigation. High angle annular dark field scanning transmission electron microscopy combined with electron energy loss spectroscopy showed that amount of cobalt in the surface nanoparticles is much higher than in the nanoribbons. X-ray photoelectron spectroscopy (XPS) revealed that cobalt atomic concentration in the sample is 1.5 wt. % of which a low is in the oxidation state Co <sup>3+</sup> . Detailed electron paramagnetic resonance characterization of this sample proved that Co <sup>2+</sup> ions occupy octahedral sites with rhombic distortion in a high-spin S = 3/2 state. Temperature dependent susceptibility measurement reveals prevailing paramagnetic behavior from which a mass ratio 1.3 wt % of Co <sup>2+</sup> was obtained and is in agreement with elemental analysis results and value extracted from XPS measurements. A weak antiferromagnetic transition at 12 K is associated with Co(OH) <sub>2</sub> nanoflakes.	
	Objavljeno v	American Chemical Society; The journal of physical chemistry; 2012; Vol. 116, no. 20; str. 11357-11363; Impact Factor: 4.814; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.402; A': 1; WoS: EI, NS, PM; Avtorji / Authors: Umek Polona, Bittencourt Carla, Gloter Alexandre, Dominko Robert, Jagličić Zvonko, Cevc Pavel, Arčon Denis	
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek	
3.	COBISS ID	25576231	Vir: COBISS.SI
Opis	Naslov	SLO	Sinteza in karakterizacija natrij titanatnih nanostruktur in TiO <sub>2</sub> nanostruktur s srebrovimi nanodelci
		ANG	Synthesis and characterization of sodium titanate and TiO <sub>2</sub> nanostructures loaded with silver nanoparticles
		SLO	Natrij titanatne nanostrukture dopirane z nanodelci Ag <sub>0</sub> smo sintetizirali iz TiO <sub>2</sub> dopiranega z ioni Ag <sup>+</sup> in NaOH(aq) pod hidrotermalnimi pogoji. V alkalnem mediju so se ioni Ag <sup>+</sup> reducirali do Ag <sub>0</sub> pri čemer so preprečili rast natrij titanatnih nanocevk. Namesto nanocevk so se formirale deloma zvite titanatne plasti. Karakterizacija s HAADF-STEM je pokazala da so Ag <sub>0</sub> nanodelci homogeno razporejeni po titanatni matriki. Premer nanodelcev Ag <sub>0</sub> je med 3 in 5 nm. V nadaljevanju smo s procesom ionske izmenjave izmenjali ione Na <sup>+</sup> s protoni kateri je sledila termična obdelava v reduktivni atmosferi. Pri tem je potekla pretvorba protoniranega titanata v TiO <sub>2</sub> . Opazili smo, da se je premer nanodelcev Ag <sub>0</sub> po ionski izmenjavi zmanjšal (2-4 nm).
			odium titanate nanostructures loaded with Ag <sub>0</sub> nanoparticles were synthesized from Ag <sup>+</sup> doped anatase and NaOH(aq) under hydrothermal

		conditions. In alkaline media reduction of Ag <sup>+</sup> to Ag <sup>0</sup> took place. Formed Ag nanoparticles prevented formation of sodium titanate nanotubes. Instead of nanotubes half rolled sodium titanate slabs were formed. HAADF-STEM characterization revealed that Ag <sup>0</sup> nanoparticles, with diameters 3–5 nm, are homogeneously distributed on titanate matrix. By ion exchange sodium ions were exchanged with protons. During thermal treatment in reductive atmosphere titanate slabs transformed to TiO <sub>2</sub> slabs loaded with Ag <sup>0</sup> nanoparticles. In addition, during an ion-exchange process the diameter of Ag <sup>0</sup> nanoparticles (2–4 nm) when compared to Ag <sup>0</sup> nanoparticles in the as synthesized sample.
	Objavljeno v	American Institute of Physics; Proceedings of the 14th Nanoscience and Nanotechnology Symposium, (NNS2011), September 23-25, 2011, Bali, Indonesia; AIP conference proceedings; 2011; Vol. 1415; str. 24-27; Avtorji / Authors: Umek Polona, Gloter Alexandre, Navio Cristina, Bittencourt Carla
	Tipologija	1.08 Objavljeni znanstveni prispevek na konferenci
4.	COBISS ID	26294311   Vir: COBISS.SI
	Naslov	<p><i>SLO</i> Raziskave natrij titanatnih nanocevk z NEXAFS tehniko z atomsko resolucijo in podprte s teoretičnimi izračuni</p> <p><i>ANG</i> Towards atomic resolution in sodium titanate nanotubes using near-edge X-ray-absorption fine-structure spectromicroscopy combined with multichannel multiple-scattering calculations</p>
	Opis	<p><i>SLO</i> Sklopitev NEXAFS tehnike z X-žarkovnim mikroskopom (TXM) je omogočila istočasne meritve velikega števila posameznih nanostruktur. Ta kombinacija ima prostorsko resolucijo, ki se približuje 10 nm in spektroskopsko resolucijo <math>E/\Delta E = 104</math>. Prostorska resolucija TXM je omejena s tako imenovanim "zone plate-om". V našem primeru smo se "premajhni" resoluciji izognili s teoretičnim modeliranjem. Na primeru natrij titanatnih nanocevk, ki imajo povprečen premer 10 nm, smo določili kompleksno strukturo na nanoskali. NEXAFS-TXM meritve v kombinaciji s teoretičnimi izračuni so omogočile da smo določili posamezne tipe Ti in O atomov in celo tipe -OH skupin.</p> <p><i>ANG</i> Recent advances in near-edge X-ray-absorption fine-structure spectroscopy coupled with transmission X-ray microscopy (NEXAFS-TXM) allow large-area mapping investigations of individual nano-objects with spectral resolution up to <math>E/\Delta E = 104</math> and spatial resolution approaching 10 nm. While the state-of-the-art spatial resolution of X-ray microscopy is limited by nanostructuring process constrains of the objective zone plate, we show here that it is possible to overcome this through close coupling with high-level theoretical modelling. Taking the example of isolated bundles of hydrothermally prepared sodium titanate nanotubes ((Na,H)TiNTs) we are able to unravel the complex nanoscale structure from the NEXAFS-TXM data using multichannel multiplescattering calculations, to the extent of being able to associate specific spectral features in the O K-edge and Ti L-edge with oxygen atoms in distinct sites within the lattice. These can even be distinguished from the contribution of different hydroxyl groups to the electronic structure of the (Na,H)TiNTs.</p>
	Objavljeno v	Beilstein-Institut zur Förderung der Chemischen Wissenschaften; Beilstein journal of nanotechnology; 2012; Vol. 3; str. 789-797; Impact Factor: 2.374; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.402; A': 1; WoS: NS, PM, UB; Avtorji / Authors: Bittencourt Carla, Krüger Peter, Lagos Maureen J., Ke Xiaoxing, Van Tendeloo Gustaaf, Ewels Christopher Paul, Umek Polona, Guttman Peter
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek

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

Družbeno-ekonomski dosežek		
1.	COBISS ID	27035943 Vir: COBISS.SI
Naslov	SLO	Vpliv kalciniranja na morfologijo in oksidacijsko stanje mangana v TiO <sub>2</sub> nanostrukturah sintetiziranih iz 1D titanatnih nanostruktur dopiranih z Mn <sup>2+</sup>
	ANG	The effect of the thermal treatment on morphology and oxidation states of manganese in TiO <sub>2</sub> nanostructures derived from titanate precursor doped with Mn <sup>2+</sup>
Opis	SLO	Vabljeni predavanje na mednarodni konferenci »The 15th International Conference of Physical Chemistry – ROMPHYCHEM15«, 11.-13. 9. 2013, Bukarešta, Romunija. Predavanje je bilo razdeljeno na dva dela in sicer (i) sintezo s poudarkom na vplivu sintezne temperature na različno razporeditev mangana v produktih in na morfologijo nastalih titanatnih nanostruktur in (ii) pretvorbi titanatnih nanostruktur doped with Mn <sup>2+</sup> v TiO <sub>2</sub> nanostrukture in študijo oksidacijskih stanj mangana v TiO <sub>2</sub> nanostrukturah in lokalnem okolju mangana.
	ANG	An invited talk at the international conference »The 15th International Conference of Physical Chemistry – ROMPHYCHEM15«, 11. 13. 9. 2013, Bucharest, Romania. The talk was divided into two parts; (i) synthesis with the focus on the impact of reaction temperature on manganese distribution in the products and on morphology of titanate nanostructures, and (ii) transformation of titanate nanostructures doped with Mn <sup>2+</sup> and the study of oxidations states of manganese in TiO <sub>2</sub> nanostructures and as well study of manganese local environment in these nanostructures.
Šifra	B.04 Vabljeni predavanje	
Objavljeno v	"Ilie Murgulescu" Institute of Physical Chemistry; Abstracts; 2013; Str. 107; Avtorji / Authors: Umek Polona, Bittencourt Carla, Glotter Alexandre, Guttman Peter, Škapin Srečo D., Arçon Denis	
Tipologija	1.10 Objavljeni povzetek znanstvenega prispevka na konferenci (vabljeni predavanje)	
2.	COBISS ID	25955623 Vir: COBISS.SI
Naslov	SLO	Hidrotermalna sinteza in vplivi reakcijskih parametrov na morfologijo in dimezije natrij titanatnih in MnO <sub>2</sub> nanostruktur
	ANG	Hydrothermal synthesis and the influence of hydrothermal reaction parameters on the morphology and dimensions of sodium titanate and MnO <sub>2</sub> nanostructures
Opis	SLO	Vabljeni predavanje je bilo namenjeno dodiplomskim študentom na Univerziteti Rovira i Virgili, Tarragona Španija in je bilo organizirano v okviru »Student Meeting on Electronic Engineering, Junij 20-21, 2012«. Študentom je bil predstavljen razvoj hidrotermalne sinteze in njen industrijski pomen. Na nekaj primerih pa je bil pojasnjen vpliv reakcijskih parametrov na morfologijo in dimezije sintetiziranih nanodelcev.
	ANG	Invited lecture for undergraduated students at Univerziteti Rovira i Virgili, Tarragona, Spain within annual meeting »Student Meeting on Electronic Engineering, Junij 20-21, 2012«. It was presented a development of hydrothermal synthesis and its industrial importance. In few examples the impact of reaction conditions on morphology and dimensions synthesized nanoparticles was discussed.
Šifra	B.04 Vabljeni predavanje	



	Objavljeno v	Universitat Rovira i Virgili, Departament d'Enginyeria Electrònica i Automàtica; Book of abstracts; 2012; Str. 15; Avtorji / Authors: Umek Polona	
	Tipologija	1.10 Objavljeni povzetek znanstvenega prispevka na konferenci (vabljen predavanje)	
3.	COBISS ID	25956135	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Določitev lokalne koordinacije in oksidacijskih stanj kobalta v natrij titanatnih nanopasovih
		ANG	Determination of the local coordination and valance states of cobalt in sodium titanate nanoribbons
	Opis	SLO	Predavanje na »4th International conference on Nano-Structures Self-Assembly«, Italija je bilo na temo dopiranja natrij titanatnih nanopasov z ioni Co <sup>2+</sup> in sicer vpliva prisotnosti Co <sup>2+</sup> v reakcijski zmesi na morfologijo in njegovo »vgradnjo« v strukturo natrij titanatnih nanopasov. To smo raziskovali z več različnimi karakterizacijskimi tehnikami: HAADF-STEM v kombinaciji z EEL spektroskopijo, XRD, EPR, XPS in magnetnimi meritvami. Poglej točko 6.2..
		ANG	In the lecture at the 4th International conference on Nano-Structures Self-Assembly, Italy the synthesis of sodium titanate nanoribbons doped with Co <sup>2+</sup> was presented. The local coordination and oxidation states of cobalt ions was determined by several different characterization techniques: HAADF-STEM in combination with EEL spectroscopy, XRD, EPR, XPS and magnetic measurements. See 6.2..
	Šifra	B.03 Referat na mednarodni znanstveni konferenci	
	Objavljeno v	s. n.]; Program and book of abstracts; 2012; Str. 82; Avtorji / Authors: Umek Polona, Gloter Alexandre, Bittencourt Carla, Hitchcock A. P., Nafi Ebrahim, Dominko Robert, Jagličič Zvonko, Arčon Denis	
	Tipologija	1.12 Objavljeni povzetek znanstvenega prispevka na konferenci	
4.	COBISS ID	27547175	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	TiO <sub>2</sub> nanopasovi: izboljšane površinske lastnosti za nadaljnjo funkcionalizacijo
		ANG	TiO <sub>2</sub> nanoribbons: improved surface properties for further functionalization
	Opis	SLO	Pretvorba protoniranih titanatnih nanopasov v anataz je potekala s kalcinacijo na zraku in pod hidrotermalnimi pogoji v avtoklavu in mikrovalovnem reaktorju. Izolirane produkte smo karakterizirali z elektronsko mikroskopijo (SEM) in termogravimetrično analizo. SEM preiskave so razkrile da pogoji pretvorbe ne vplivajo na morfologijo imajo pa velik vpliv na površino pasov. Površina produktov nastalih pod hidrotermalnimi pogoji je postala razbrazdana. To se je odražalo v povečanju specifične površine za 2x večjemu št površinskih OH skupin (TGA, DRIFT in XPS rezultati).  V nadaljevanju smo površino anataznih nanopasov funkcionalizirali s silani. Proučili smo vpliv topila (voda in etanol), prisotnost katalizatorja (NH <sub>3</sub> (aq), in število hidrolizabilnih skupin v silanu ((3-aminopropyltriethoxysilane and 3-aminopropyl-diethoxymethylsilane). Funkcionalizirane nanopasove smo karakterizirali z infrardečo spektroskopijo (DRIFT) in XPS tehniko. Glede na vsebnost N (XPS) so se kot najboljši pogoji izkazali če je reakcija potekala v vodi s silanom s tremi hidrolizabilnimi skupinami. Po pričakovanju je bila funkcionalizacija nanopasov z več površinskimi OH skupinami uspešnejša.

	ANG	with electron microscopy (SEM and TEM), thermogravimetric analysis (TGA) and specific surface area analysis (BET). SEM investigation revealed that the transformation conditions did not affect the nanoribbon morphology but had a strong impact on the nanoribbon surface. Surface of the NRs transformed under hydrothermal conditions became rougher. The change of the surface was also reflected in an increased surface area (BET) and therefore in a larger amount of surface hydroxyl (-OH) groups (TGA) in comparison to the product obtained by calcination in air. Surface of anatase NRs was functionalized with silanes. Influence of solvent (water and ethanol), presence of a catalyst (NH <sub>3</sub> (aq)), and a number of hydrolysable groups of silane (3-aminopropyltriethoxysilane and 3-aminopropyl-diethoxymethylsilane) was examined. Functionalized anatase NRs were characterized with diffuse reflectance infrared Fourier transform spectroscopy (DRIFT) and X-ray photoelectron spectroscopy (XPS). XPS analyses elucidated that anatase NRs were the best functionalized in water without the catalyst with the silane with three hydrolysable groups. As expected, the anatase NRs with a larger amount of hydroxyl groups were more efficiently grafted with silanes than the product obtained by calcination in air. Such functionalized anatase NRs will be used for further composite synthesis.
Šifra	B.06	Drugo
Objavljeno v	s. n.]; HINT - WG2&3 meeting: Modeling and characterization of hybrid interfaces, 3-4 March 2014, Urbino, Italy [and] Early stage researchers (ESR) meeting, 5 March 2014, Urbino, Italy; 2014; Avtorji / Authors: Rutar Melita, Cerc Korošec Romana, Le Trequesser Q., Labrugere C., Delville M. H., Umek Polona	
Tipologija	1.12	Objavljeni povzetek znanstvenega prispevka na konferenci

## 8. Drugi pomembni rezultati projektne skupine<sup>7</sup>

1) V letu 2011 je na tematiki, ki sodi v okvir projekta pod mentorstvom prof. dr. Denis Arčona, člana projektne skupine, diplomirala Ana Dergan (Fakulteta za fiziko in matematiko Univerze v Ljubljani). Naslov njenega diplomskega dela je "EPR študija prenosa naboja na površini titan dioksidnih nanodelcev".

COBIS ID: 25219111

V okviru diplomskega dela je Ana Dergan raziskovala vpliv morfologije in velikosti nanodelcev anataza na fotokemijsko aktivnost. Pod vplivom UV in vidne svetlobe je študirala nastale paramagnetne centre v nanopalčkah TiO<sub>2</sub> in komercialno dostopnih prahovih nanometrijskih in mikrometrijskih dimenzij. Nanopalčke TiO<sub>2</sub> so bile pripravljene iz natrij titanatnih nanocevk. Nastale centre je detektirala z elektronsko paramagnetni resonanco (EPR), g-faktorje pa je nato izračunala s pomočjo teorije kristalnega polja. V okviru EPR meritev je izmerila tudi časovno odvisnost signala. Oboji, elektroni in vrzeli, se lahko ujamejo pri čemer nastanejo EPR aktivni centri. Elektroni se ujamejo kot Ti<sup>3+</sup> ali O<sub>2</sub><sup>-</sup> centri, vrzeli pa kot O<sup>-</sup> centri. S pripravo sončnih celic Grätzlovega tipa je nato ocenila fotokemijsko aktivnost nanodelcev TiO<sub>2</sub> v anatazni olbiki. Izkoristek sončnih celic pripravljenih na osnovi nanopalčk TiO<sub>2</sub> v primerjavi s komercialnim nanodelci TiO<sub>2</sub> je še enkrat višji.

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

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

SLO

Prve raziskave aplikativnih lastnosti natrij titanatnih nanocevk in nanopasov so pokazale da so ti materiali perspektivni za kisl/bazično katalizo v organskih reakcijah, hranjenje energije v

obliki Li ionskih baterij, pri fotokemijskem razpadu nekaterih organskih spojin in tudi kot polnila v nanokompozitih, ki mehansko ojačajo polimer.

V nekatere od teh raziskav se je vključila tudi naša projektna skupina.

S področja pretvorb protoniranih titanatnih nanocevk in nanopasov v TiO<sub>2</sub> pod različnimi pogoji, kjer je bil povdarek na ohranitiv morfologije smo ugotovili:

-da je za pretvorbo protoniranih titanatnih nanostruktur v TiO<sub>2</sub> pod hidrotermalnimi pogoji nujno potrebna prisotnost vode in da ta pretvorba vedno vodi le do nastanka anatazne oblike TiO<sub>2</sub>

-ugotovili smo, da način pretvorbe bistveno vpliva na fotokatalitske sposobnosti dobljenih materialov; npr. vzorci antaznih nanopasov dopiranih z N so bistveno manj fotokemijsko aktivni kot tisti brez N

Odpri smo novo področje raziskav natrij in protoniranih titanatnih nanocevk in nanopasov v kislno/bazični katalizi za pretvorbe v organski kemiji. Modelni reakciji aldolne kondenzacije in Manichove reakcije v primeru reakcijske zmesi (aldolna kondenzacija: benzaldehid+cikloheksanon, Manichova reakcija: benzaldehid+cikloheksanon+4-bromoanilin) kažejo da se z uporabo teh materialov kot katalizatorjev poveča selektivnost reakcije, prav tako je v večini primerov večji tudi izkoristek.

Za raziskovanje strukture na posameznih titanatnih in TiO<sub>2</sub> nanostrukturah smo med prvimi na svetu uporabili kombinacijo tehnik NEXAFS-TXM z izboljšano prostorsko resolucijo:

-v primeru natrij titanatnih nanocevk smo z meritvami NEXAFS-TXM, ki so bile podprte s teoretičnimi izračuni določilo strukturo površine teh nanomaterialov. To je bilo ključno pri njihovi nadaljni uporabi v vlogi katalizatorja v kislno/bazični katalizi in za nadaljnjo funkcionalizacijo s silani.

-v primeru problematike določanje oksidacijskega stanja mangana v titanatnih in TiO<sub>2</sub> nanostrukturah dopiranih z Mn<sup>2+</sup>, smo z meritvami na posameznih nanostrukturah pokazali da do oksidacije Mn<sup>2+</sup> v Mn<sup>3+</sup> pride šele pri pretvorbi anatazne oblike TiO<sub>2</sub> v rutilno obliko. To je nad 600 C.

Pri sintezi dopiranih titanatnih nanocevk in nanopasov smo pokazali da prisotnost dopantov Ag<sup>+</sup> in Mn<sup>2+</sup> vpliva na spremembo morfologije pri reakcijskih pogojih za rast nanocevk. Ob prisotnosti omenjenih dopantov v reakcijski zmesi namesto titanatnih nanocevk nastanejo deloma zvite 2D nanostrukture, ki jih gradi 2-5 titanatnih plasti. V primeru dopiranja s Ag<sup>+</sup> se je ta reducirala do Ag<sup>0</sup>. Pri natrij titanatnih nanopasovih dopiranih z Mn<sup>2+</sup> smo pokazali da prisotnost mangana ne vpliva na nastalo morfologijo in, da alkalni reakcijski pogoji pri sintezi ne vplivajo na spremembo oksidacijskega stanja mangana.

ANG

The first applied study studies of sodium titanate nanotube and nanoribbon properties have shown that these materials are promising in acidic/base catalysis for organic transformations, for energy storage, in the photochemical decomposition of some organic compounds and as fillers in the nanocomposites where they mechanically strengthen the polymer matrix.

In some of these studies our project group has been taking part. We reached the following findings which are important for the further development in this area of research:

In the field of transformation of protonated titanate nanotubes and nanoribbons to TiO<sub>2</sub> under different conditions, where the emphasis was on morphology preservation we found:

-to transform protonated titanate nanostructures to TiO<sub>2</sub> nanostructures under hydrothermal conditions is necessary the presence of water and that regardless the reaction conditions (temperature and pressure) the conversion always yields anatase form of TiO<sub>2</sub>.

-we found that transformation conditions significantly affect the photocatalytic ability derived materials; for example photochemical activity of anatase nanoribbons were significantly lowered in comparison to those without N.

Another area of research was to test sodium titanate nanotubes/nanoribbons and protonated titanate nanotubes/nanoribbons in acidic/base catalysis in organic chemistry. Two model reactions were selected: (i) aldol condensation (benzaldehyde + cyclohexanone) and (ii) Manich

reaction (benzaldehyde + cyclohexanone +4-bromoaniline). Results suggest that these catalysts increase the reaction selectivity and in most cases also the yield is increased.

We were one of the first on the world to use a combination of two techniques, NEXAFS and TXM, with improved spatial resolution that enabled to do NEXAFS measurements on the individual nanostructures:

-taking the example of isolated bundles of hydrothermally prepared sodium titanate nanotubes, we are able to unravel the complex nanoscale structure from the NEXAFS-TXM data using multichannel multiplescattering calculations, to the extent of being able to associate specific spectral features in the O K-edge and Ti L-edge with oxygen atoms in distinct sites within the lattice. These can even be distinguished from the contribution of different hydroxyl groups to the electronic structure of the sodium titanate nanotubes

-in the case of determining the oxidation state of manganese in sodium titanate and TiO<sub>2</sub> nanostructures doped with Mn<sup>2+</sup>, measurements were done on the individual nanostructures and showed manganese oxidation state did not change during the synthesis of sodium titanate nanoribbons doped with manganese although Mn<sup>2+</sup> is very unstable in alkaline conditions and tends to oxidize to Mn<sup>3+</sup>. The oxidation from 2+ to 3 and 4+ occurred on calcination of protonated titanate nanoribbons at 700 C in air.

In the case of synthesis of sodium titanate nanotubes/nanoribbons and doped sodium titanate nanotubes/nanoribbons we have shown that the presence of dopants, Ag<sup>+</sup> and Mn<sup>2+</sup>, effect on the change in morphology. In the presence of these dopants in the reaction mixture instead of titanate nanotubes partly rolled 2D nanostructures were formed built by 2-5 titanate layers. In the case of doping with silver, Ag<sup>+</sup> was reduced to Ag<sup>0</sup>. In the case of sodium titanate nanoribbons doped with Mn<sup>2+</sup>, we have shown that the presence of manganese does not affect the morphology and that dopant did not change its oxidation state.

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

SLO

Enodimenzionalni titanatni in TiO<sub>2</sub> nanomateriali so materiali z izrednim potencialom pri aplikacijah s področja katalize, in sicer pri kislo/bazični katalizi v organski kemiji in fotokatalizi za razgradnjo organskih polutantov. Prav tako so se pokazali kot dober podporni material pri pripravi nanokompozitov.

Pomen za rezultatov dobljenih v okviru projekta za razvoj Slovenije je predvsem v izobraževanju mladih kadrov;

- (i) na tematiki projekta je diplomirala Ana Dergan (fotoaktivnost TiO<sub>2</sub> nanocevk, 2011, Fakulteta za fiziko in matematiko, Univerza v Ljubljani, mentor: prof. dr. Denis Arčon)
- (ii) Katja Vozelj bo na 2. bolonjski stopnji predvidoma diplomirala do konca avgusta 2014 (EPR karakterizacija z N dopiranih TiO<sub>2</sub> nanopasov, Fakulteta za fiziko in matematiko, Univerza v Ljubljani, mentor: prof. dr. Denis Arčon)
- (iii) Melita Rutar, mlada raziskovalka (katalitske lastnosti titanatnih in TiO<sub>2</sub> 1D nanostruktur, predvideni rok za doktorat je maj 2016, Mednarodna podiplomska šola Jožefa Stefana, mentorica: dr. Polona Umek).

ANG

One-dimensional titanate and TiO<sub>2</sub> nanomaterials have proved to have big potential for applications in the field of catalysis, namely the acidic/base catalysis in organic chemistry and photocatalysis for degradation of organic pollutants. They have also proved to be a good support material for the preparation of nanocomposites.

The importance of the results obtained in the framework of the project for the development of Slovenia is in the education of undergraduate students and young researchers:

- (i) Ana Dergan graduated on the topic of the project g (photoactivity of TiO<sub>2</sub> nanotubes, 2011, Faculty of Physics and Mathematics, University of Ljubljana, supervisor: prof. dr. Denis Arčon)
- (ii) Katja Vozelj will graduate on till end of august 2014 (EPR study of N doped TiO<sub>2</sub> nanoribbons, Faculty of Physics and Mathematics, University of Ljubljana, supervisor: prof. dr. Denis Arčon)
- (iii) Melita Rutar, young researcher (catalytic properties of titanate and TiO<sub>2</sub> 1D nanostructures,

deadline: May 2016, International Postgraduate School of Jožef Stefan, supervisor: dr. Polona Umek).

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

Cilj		
<b>F.01</b>	<b>Pridobitev novih praktičnih znanj, informacij in veščin</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.02</b>	<b>Pridobitev novih znanstvenih spoznanj</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.03</b>	<b>Večja usposobljenost raziskovalno-razvojnega osebja</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.04</b>	<b>Dvig tehnološke ravni</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.05</b>	<b>Sposobnost za začetek novega tehnološkega razvoja</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.06</b>	<b>Razvoj novega izdelka</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.07</b>	<b>Izboljšanje obstoječega izdelka</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.08</b>	<b>Razvoj in izdelava prototipa</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE

	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.09</b>	<b>Razvoj novega tehnološkega procesa oz. tehnologije</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.10</b>	<b>Izboljšanje obstoječega tehnološkega procesa oz. tehnologije</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.11</b>	<b>Razvoj nove storitve</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.12</b>	<b>Izboljšanje obstoječe storitve</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.13</b>	<b>Razvoj novih proizvodnih metod in instrumentov oz. proizvodnih procesov</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.14</b>	<b>Izboljšanje obstoječih proizvodnih metod in instrumentov oz. proizvodnih procesov</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.15</b>	<b>Razvoj novega informacijskega sistema/podatkovnih baz</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.16</b>	<b>Izboljšanje obstoječega informacijskega sistema/podatkovnih baz</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>

<b>F.17</b>	<b>Prenos obstoječih tehnologij, znanj, metod in postopkov v prakso</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.18</b>	<b>Posredovanje novih znanj neposrednim uporabnikom (seminarji, forumi, konference)</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.19</b>	<b>Znanje, ki vodi k ustanovitvi novega podjetja ("spin off")</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.20</b>	<b>Ustanovitev novega podjetja ("spin off")</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.21</b>	<b>Razvoj novih zdravstvenih/diagnostičnih metod/postopkov</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.22</b>	<b>Izboljšanje obstoječih zdravstvenih/diagnostičnih metod/postopkov</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.23</b>	<b>Razvoj novih sistemskih, normativnih, programskih in metodoloških rešitev</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.24</b>	<b>Izboljšanje obstoječih sistemskih, normativnih, programskih in metodoloških rešitev</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.25</b>	<b>Razvoj novih organizacijskih in upravljaljskih rešitev</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE

	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.26 Izboljšanje obstoječih organizacijskih in upravljavskih rešitev</b>		
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.27 Prispevek k ohranjanju/varovanju naravne in kulturne dediščine</b>		
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.28 Priprava/organizacija razstave</b>		
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.29 Prispevek k razvoju nacionalne kulturne identitete</b>		
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.30 Strokovna ocena stanja</b>		
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.31 Razvoj standardov</b>		
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.32 Mednarodni patent</b>		
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.33 Patent v Sloveniji</b>		
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.34 Svetovalna dejavnost</b>		



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

**Komentar**


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

	Vpliv	Ni vpliva	Majhen vpliv	Srednji vpliv	Velik vpliv	
<b>G.01</b>	<b>Razvoj visokošolskega izobraževanja</b>					
G.01.01.	Razvoj dodiplomskega izobraževanja	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.01.02.	Razvoj podiplomskega izobraževanja	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.01.03.	Drugo: <input type="text"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
<b>G.02</b>	<b>Gospodarski razvoj</b>					
G.02.01	Razširitev ponudbe novih izdelkov/storitev na trgu	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.02.	Širitev obstoječih trgov	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.03.	Znižanje stroškov proizvodnje	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.04.	Zmanjšanje porabe materialov in energije	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.05.	Razširitev področja dejavnosti	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.06.	Večja konkurenčna sposobnost	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.07.	Večji delež izvoza	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.08.	Povečanje dobička	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.09.	Nova delovna mesta	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.10.	Dvig izobrazbene strukture zaposlenih	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.11.	Nov investicijski zagon	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.12.	Drugo: <input type="text"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
<b>G.03</b>	<b>Tehnološki razvoj</b>					
G.03.01.	Tehnološka razširitev/posodobitev dejavnosti	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.03.02.	Tehnološko prestrukturiranje dejavnosti	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.03.03.	Uvajanje novih tehnologij	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.03.04.	Drugo: <input type="text"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	

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

**Komentar**

--

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

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

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

### 13.1. Izjemni znanstveni dosežek

### 13.2. Izjemni družbeno-ekonomski dosežek

## C. IZJAVE

Podpisani izjavljam/o, da:

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

### Podpisi:

*zastopnik oz. pooblaščen oseba  
raziskovalne organizacije:*

in

*vodja raziskovalnega projekta:*

Institut "Jožef Stefan"

Polona Umek

**ŽIG**

Kraj in datum:

### Oznaka prijave: ARRS-RPROJ-ZP-2014/17

<sup>1</sup> Napišite povzetek raziskovalnega projekta (največ 3.000 znakov v slovenskem in angleškem jeziku) [Nazaj](#)

<sup>2</sup> Napišite kratko vsebinsko poročilo, kjer boste predstavili raziskovalno hipotezo in opis raziskovanja. Navedite ključne ugotovitve, znanstvena spoznanja, rezultate in učinke raziskovalnega projekta in njihovo uporabo ter sodelovanje s tujimi partnerji. Največ 12.000 znakov vključno s presledki (približno dve strani, velikost pisave 11). [Nazaj](#)

<sup>3</sup> Realizacija raziskovalne hipoteze. Največ 3.000 znakov vključno s presledki (približno pol strani, velikost pisave 11) [Nazaj](#)

<sup>4</sup> V primeru bistvenih odstopanj in sprememb od predvidenega programa raziskovalnega projekta, kot je bil zapisan v predlogu raziskovalnega projekta oziroma v primeru sprememb, povečanja ali zmanjšanja sestave projektne skupine v zadnjem letu izvajanja projekta, napišite obrazložitev. V primeru, da sprememb ni bilo, to navedite. Največ 6.000 znakov vključno s presledki (približno ena stran, velikost pisave 11). [Nazaj](#)

<sup>5</sup> Navedite znanstvene dosežke, ki so nastali v okviru tega projekta. Raziskovalni dosežek iz obdobja izvajanja projekta (do oddaje zaključnega poročila) vpišete tako, da izpolnite COBISS kodo dosežka – sistem nato sam izpolni naslov objave, naziv, IF in srednjo vrednost revije, naziv FOS področja ter podatek, ali je dosežek uvrščen v A'' ali A'. [Nazaj](#)

<sup>6</sup> Navedite družbeno-ekonomske dosežke, ki so nastali v okviru tega projekta. Družbeno-ekonomski rezultat iz obdobja izvajanja projekta (do oddaje zaključnega poročila) vpišete tako, da izpolnite COBISS kodo dosežka – sistem nato sam izpolni naslov objave, naziv, IF in srednjo vrednost revije, naziv FOS področja ter podatek, ali je dosežek uvrščen v A'' ali A'.

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

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

<sup>7</sup> Navedite rezultate raziskovalnega projekta iz obdobja izvajanja projekta (do oddaje zaključnega poročila) v primeru,

da katerega od rezultatov ni mogoče navesti v točkah 6 in 7 (npr. ni voden v sistemu COBISS). Največ 2.000 znakov, vključno s presledki. [Nazaj](#)

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

<sup>9</sup> Največ 4.000 znakov, vključno s presledki [Nazaj](#)

<sup>10</sup> Največ 4.000 znakov, vključno s presledki [Nazaj](#)

<sup>11</sup> Rubrike izpolnite / prepisite skladno z obrazcem "izjava sofinancerja" <http://www.arrs.gov.si/sl/progproj/rproj/gradivo/>, ki ga mora izpolniti sofinancer. Podpisan obrazec "Izjava sofinancerja" pridobi in hrani nosilna raziskovalna organizacija – izvajalka projekta. [Nazaj](#)

<sup>12</sup> Navedite en izjemni znanstveni dosežek in/ali en izjemni družbeno-ekonomski dosežek raziskovalnega projekta v letu 2013 (največ 1000 znakov, vključno s presledki). Za dosežek pripravite diapozitiv, ki vsebuje sliko ali drugo slikovno gradivo v zvezi z izjemnim dosežkom (velikost pisave najmanj 16, približno pol strani) in opis izjemnega dosežka (velikost pisave 12, približno pol strani). Diapozitiv/-a priložite kot priložitev/-i k temu poročilu. Vzorec diapozitiva je objavljen na spletni strani ARRS <http://www.arrs.gov.si/sl/gradivo/>, predstavitev dosežkov za pretekla leta pa so objavljena na spletni strani <http://www.arrs.gov.si/sl/analize/dosez/>. [Nazaj](#)

Obrazec: ARRS-RPROJ-ZP/2014 v1.03  
15-10-C8-C5-10-0C-A4-D3-66-D5-1E-BC-C8-D3-12-5D-11-C8-85-D7