

Oznaka poročila: ARRS-RPROG-ZP-2015/125



## 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

<b>Šifra programa</b>	P1-0112
<b>Naslov programa</b>	Raziskave atomov, molekul in struktur s fotoni in delci Studies of atoms, molecules and structures by photons and particles
<b>Vodja programa</b>	11854 Matjaž Žitnik
<b>Obseg raziskovalnih ur (vključno s povečanjem financiranja v letu 2014)</b>	53310
<b>Cenovni razred</b>	C
<b>Trajanje programa</b>	01.2009 - 12.2014
<b>Izvajalci raziskovalnega programa (javne raziskovalne organizacije - JRO in/ali RO s koncesijo)</b>	106 Institut "Jožef Stefan" 795 Univerza v Mariboru, Fakulteta za strojništvo 1540 Univerza v Novi Gorici 1554 Univerza v Ljubljani, Fakulteta za matematiko in fiziko
<b>Raziskovalno področje po šifrantu ARRS</b>	1 NARAVOSLOVJE 1.02 Fizika
<b>Družbeno-ekonomski cilj</b>	13.01 Naravoslovne vede - RiR financiran iz drugih virov (ne iz SUF)
<b>Raziskovalno področje po šifrantu FOS</b>	1 Naravoslovne vede 1.03 Fizika

### B. REZULTATI IN DOSEŽKI RAZISKOVALNEGA PROGRAMA

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

SLO

Raziskovalni program temelji na preučevanju interakcije Coulombskih sistemov s svetlobo, elektroni in ionskimi žarki pri izmenjavi energij na področju od nekaj eV do nekaj deset keV -

te energije so dovolj visoke za vzbujanje elektronskih prostostnih stopenj atomov, molekul in struktur, ki se potem sproščajo preko množice različnih razpadnih kanalov. Uporabljamo napredne spektroskopske (slikovne, koincidenčne) tehnike za preučevanje strukture snovi in odziva na zunanje motnje. Preučujemo posebnosti večelektronskih in večatomske sistemov, ki so izpostavljeni zaporedju osnovnih interakcij v specialnih okoljih ter iščemo nove možnosti za uporabo njihovega netrivialnega (nelinearnega) odziva za povečanje občutljivosti analitičnih tehnik. Optimiziramo uporabo uveljavljenih tehnik za analizo snovi s sinhrotronsko svetlobo in ionskimi žarki (XANES, EXAFS, XES, PES, AES, XRF, TRXS, PIXE, RBS, ERDA, NRA, PIGE, SIMS, Moessbauer) v smislu povečane prostorske in/ali časovne ločljivosti, uvajamo nove in napredne pristope (RIXS, XRS, MeVSIMS) ter posredujemo njihovo uporabo drugim raziskovalnim in uporabniškim področjem. Elementno slikanje z ionskim mikrožarkom, ki temelji na standardni rentgenski spektroskopiji, dopolnjujemo s kemijsko občutljivostjo in sicer z uvajanjem boljše energijske ločljivosti (WDS) in z masno spektroskopijo sekundarnih ionov. Pri študiju redke snovi (atomi, molekule in skupki) se posebej zanimamo za njihovo preučevanje z močnimi viri koherentne svetlobe (laser na proste elektrone, High-Harmonic-Generation) ter s sklopitvijo ionskih žarkov z učinkovitimi pristopi k elektronski spektrometriji (magnetna steklenica na čas preleta). Ukvarjamo se s tehnikami za in-situ ter in-operando preiskave materialov, ki so relevantni za energetiko, prevsem s preučevanjem stikov tankih organskih plasti s kovinami, z raziskavami interakcije materialov z vodikom ter s fizikalno analizo sestavnih delov kemičnih reaktorjev (sončne celice, stene fuzijskega reaktorja, baterije). Poudarek je na razvoju tehnike slikanja rezin bioloških tkiv za raziskave kot so rastlinski hiperakumulatorji, problematiki rasti v ekstremnih razmerah ter na nanotoksikologiji. Razvijamo tehnike XRF za hitre in prenosne raziskave najrazličnejših snovi (tipiziranje odziva prehrabnih artiklov, sortiranje kovin in plastike, poreklo artefaktov). Vzdržujemo nekaj dobro opremljenih eksperimentalnih postaj za raziskave z ionskimi žarki, ki privabijo tudi tuje raziskovalne skupine in aktivno sodelujemo v tekmi za merilni čas v sinhrotronskih centrih v Evropi in drugod po svetu, tudi s svojo veliko eksperimentalno opremo (visokoločljivi spektrometer za rentgensko svetlobo).

ANG

This research programme deals with an interaction of Coulombic systems with light, electron and ion beams characterized by energy exchange in ranging from a few eV to a few tens of keV. This is high enough to excite electronic degrees of freedom which then relax through a number of decay channels triggering specific system evolution. The advanced spectroscopic (imaging) techniques are applied to study the structure of matter and its response to the external perturbations. We are interested in peculiarities of multielectron and multiatomic systems that are exposed to the sequence of basic interactions in special environments and we are looking for new opportunities to use their nontrivial (nonlinear) response to increase the sensitivity of analytical techniques. We are optimizing applications of known standard techniques for analysis of matter (XANES, EXAFS, XES, PES AES, XRF, TRXS, PIXE, RBS, ERDA, NRA, PIGE, SIMS, Moessbauer) to higher spatial and/or temporal resolution, we are introducing advanced approaches for material studies (RIXS, XRS, MeVSIMS) and we link all this techniques to other fields of research and application. The elemental imaging with an ion microprobe which is based on a standard x-ray spectroscopy is being supplemented by the more selective chemical sensitivity. This is achieved by adding in the secondary ion mass spectrometry and by improving energy resolution with the wavelength dispersive x-ray spectroscopic methods. In our studies of low density matter (atoms, molecules, clusters) we are emphasizing approaches with intense and coherent new light sources (free-electron laser, High-Harmonic-Generation sources) and we are testing the use of ion beams with efficient approaches to electron spectroscopy (magnetic bottle time-of-flight spectrometer). We deal with in-situ and in-operando techniques for research of materials related to energy production and energy storage. In particular, we will study functionalization of thin organic layers on metal surfaces, hydrogen interaction with materials that are relevant for energetic, and with physical analysis of chemical reactor compounds (solar cells, walls of the fusion reactor, batteries). We continue to improve imaging of biological tissue slices for our research on topics such as hyperaccumulators, growth in austere conditions and nanotoxicology. We are developing efficient and simple XRF techniques for quick and portable analysis (food, metals, plastic). We maintain a good number of experimental stations for ion beam analysis to assure a competitive interest for experiments performed by foreign research groups and we actively participate in beamtime contests at large synchrotron facilities around the world, also bringing in our own (large) experimental equipment (high resolution X-ray spectrometer).

### 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)<sup>2</sup>

SLO

V zadnjem obdobju programskega financiranja smo v vseh programskih sklopih s prizadevnim delom realizirali ustvarjalna stremjenja in v marsičem presegli velika začetna pričakovanja. Na področju osnovnih raziskav v atomski fiziki smo začeli uporabljati laserske vire svetlobe, ki smo jih kombinirali s sinhrotronsko svetlobo, uspešno pa smo izvedli tudi enega od prvih poskusov z energijsko stabiliziranim laserjem na proste elektrone. Razvili smo teoretska orodja za analizo poskusov s svetlobo velike intenzitete. Pri visokoločljivostnih meritvah rentgenske svetlobe z lastnim spektrometrom na sinhrotronu ESRF smo šli skozi zrelo obdobje v katerem smo izvedli in objavili lastne meritve ter poskrbeli za optimalne spektroskopske pristope kot sodelavci na projektih drugih raziskovalnih skupin. V tem obdobju se je skupina na področju rentgenske spektroskopije uveljavila v svetovnem merilu, kar dokazujejo vabljeni predavanja na konferencah za specialiste (EXRS), pa tudi izvedba prvega slovenskega predavanja na veliki AMO konferenci XXVIII ICPEAC (International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions). Razvili smo sposobnost modeliranja emisijskih rentgenskih spektrov molekul, kar je pomemben korak naprej v naši ekspertizi. V tem obdobju smo predlagali in skupaj s sodelavci pripravili poskus z magnetno steklenico. Pri analizah in pripravi rezultatov za objavo smo se dodobra spoznali s to novo učinkovito tehniko merjenja, ki je potencialno zanimiva tudi za meritve s hitrimi ioni. Pri študiju fizike površin smo se vključili v pomembno razvojno področje sklopitve organskih plasti s kovinami. V zadnjem obdobju financiranja smo tudi formalno uveljavili Mikroanalitski Center (MIC) kot enega od pomembnih evropskih centrov za raziskave z ionskimi žarki. To dokazuje naše članstvo v vseevropski povezavi ionskih pospeševalnikov SPIRIT, kjer MIC kotira kot center za slikanje bioloških vzorcev ter priprava svetovne konference BioPIXE 2014 na Bledu. Del gonilne sile pri tem impresivnem razvoju so tudi raziskovalci z Biotehnične fakultete UL, ki izjemno večje uporabljajo naše elementne slike pri interpretaciji pomembnih raziskovalnih problemov na področju biologije rastlin. Vlagali smo v izboljšave eksperimentalnih postaj na MIC in instalirali nov, svetlejši izvir negativnih vodikovih ionov. Uvajali smo napredne (MeVSIMS), pa tudi nove tehnike (konfokalne meritve, stereo PIXE) za analize materialov z ionskimi žarki, kjer postaja pomemben hiter časovni odziv meritev ter njihova in-situ izvedba ob spreminjanju zunanjih parametrov. Pomemben sklop naših raziskav je relevanten za energetiko (dinamike porazdelitve vodika v materialih, analiza kemijskih okolij v baterijah). Skupaj s sodelavci smo povečali število poskusov, ki jih programska skupina pripravlja in izvaja na sinhrotronih s podporo evropskih sredstev - v obdobju 2009-april 2014 smo sami, ali s sodelavci izvedli 87 poskusov, ki so bili odobreni v mednarodni konkurenci. V istem obdobju na MIC gostili 23 TNA (trans national access) projektov in povečali sodelovanje v evropskih okvirnih programih.

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

SLO

V zadnjem obdobju programskega financiranja smo v vseh programskih sklopih s prizadevnim delom realizirali ustvarjalna stremjenja in v marsičem presegli velika začetna pričakovanja. Na področju osnovnih raziskav v atomski fiziki smo začeli uporabljati laserske vire svetlobe, ki smo jih kombinirali s sinhrotronsko svetlobo, uspešno pa smo izvedli tudi enega od prvih poskusov z energijsko stabiliziranim laserjem na proste elektrone. Razvili smo teoretska orodja za analizo poskusov s svetlobo velike intenzitete. Pri visokoločljivostnih meritvah rentgenske svetlobe z lastnim spektrometrom na sinhrotronu ESRF smo šli skozi zrelo obdobje v katerem smo izvedli in objavili lastne meritve ter poskrbeli za optimalne spektroskopske pristope kot sodelavci na projektih drugih raziskovalnih skupin. V tem obdobju se je skupina na področju rentgenske spektroskopije uveljavila v svetovnem merilu, kar dokazujejo vabljeni predavanja na konferencah za specialiste (EXRS), pa tudi izvedba prvega slovenskega predavanja na veliki AMO konferenci XXVIII ICPEAC (International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions). Razvili smo sposobnost modeliranja emisijskih rentgenskih spektrov molekul, kar je pomemben korak naprej v naši ekspertizi. V tem obdobju smo predlagali in skupaj s sodelavci pripravili poskus z magnetno steklenico. Pri analizah in pripravi rezultatov za objavo smo se dodobra spoznali s to novo učinkovito tehniko merjenja, ki je potencialno zanimiva tudi za meritve s hitrimi ioni. Pri študiju fizike površin smo se vključili v pomembno razvojno področje sklopitve organskih plasti s kovinami. V zadnjem obdobju financiranja smo

tudi formalno uveljavili Mikroanalitski Center (MIC) kot enega od pomembnih evropskih centrov za raziskave z ionskimi žarki. To dokazuje naše članstvo v vseevropski povezavi ionskih pospeševalnikov SPIRIT, kjer MIC kotira kot center za slikanje bioloških vzorcev ter priprava svetovne konference BioPIXE 2014 na Bledu. Del gonilne sile pri tem impresivnem razvoju so tudi raziskovalci z Biotehnične fakultete UL, ki izjemno večje uporabljajo naše elementne slike pri interpretaciji pomembnih raziskovalnih problemov na področju biologije rastlin. Vlagali smo v izboljšave eksperimentalnih postaj na MIC in instalirali nov, svetlejši izvir negativnih vodikovih ionov. Uvajali smo napredne (MeVSIMS), pa tudi nove tehnike (konfokalne meritve, stereo PIXE) za analize materialov z ionskimi žarki, kjer postaja pomemben hiter časovni odziv meritev ter njihova in-situ izvedba ob spreminjanju zunanjih parametrov. Pomemben sklop naših raziskav je relevanten za energetiko (dinamike porazdelitve vodika v materialih, analiza kemijskih okolij v baterijah). Skupaj s sodelavci smo povečali število poskusov, ki jih programska skupina pripravlja in izvaja na sinhrotronih s podporo evropskih sredstev - v obdobju 2009-april 2014 smo sami, ali s sodelavci izvedli 87 poskusov, ki so bili odobreni v mednarodni konkurenci. V istem obdobju na MIC gostili 23 TNA (trans national access) projektov in povečali sodelovanje v evropskih okvirnih programih.

## 5.Utemeljitev morebitnih sprememb programa raziskovalnega programa oziroma sprememb, povečanja ali zmanjšanja sestave programske skupine v letu 2014<sup>4</sup>

SLO

V letu 2014 ni bilo bistvenih sprememb v sestavi programske skupine razen običajnega toka mladih raziskovalcev.

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

		Znanstveni dosežek	
1.	COBISS ID	22543143	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Separacija dvoelektronskih fotonskih sovzbuditev v bližini praga za ionizacijo notranjih vrzeli v atomih
		ANG	Separation of two-electron photoexcited atomic processes near the inner-shell threshold
	Opis	SLO	Z metodo visokoločljive spektroskopije neelastično sipanih rentgenskih žarkov smo prvič neposredno ločili različne tipe dvoelektronskih sovzbuditev v bližini praga za ionizacijo notranje lupine. Satelitske spektralne prispevke, ki izvirajo iz Ar KM-M2,3M shakeoff, shakeup in resonančnih 1s3p dvojnih vzbuditev smo izolirali na podlagi karakteristične energijske odvisnosti od vpadne energije fotonov na območju od praga za dvojne sovzbuditve do nasičenja. Pri uveljavljeni metodi s fotoabsorbpcijo so omenjeni prispevki naloženi drug na drugega in jih je mogoče zgolj približno ločiti.
		ANG	By means of a high resolution resonant inelastic x-ray scattering spectroscopy, we have for the first time separated spectral features pertaining to different twoelectron atomic processes in the vicinity of an inner-shell ionization threshold. Contributions of double excitations were extracted from the Ar KM-M2,3M x-ray satellite line intensity measured as a function of photon energy from the 1s3p double core hole threshold to the saturation. The isolated [1s3p]nln'l' excitation spectrum is critically compared to the outcome of the multiconfiguration DiracFock model with relaxation.
	Objavljeno v	American Physical Society; Physical review letters; 2009; Vol. 102, no. 14; str. 143001-1-143001-4; Impact Factor: 7.328;Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.572; A': 1; WoS: UI; Avtorji / Authors: Kavčič Matjaž, Žitnik Matjaž, Bučar Klemen, Mihelič Andrej, Štuhec Matjaž, Szlachetko J., Cao W., Alonso Mori R., Glatzel P.	
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek	
2.	COBISS ID	26125351	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Kvantifikacija dinamike prenosa naboja v TT-sklopljenih molekularnih

		sistemih
	ANG	Quantifying through-space charge transfer dynamics in TT-coupled molecular systems
Opis	SLO	Razumevanje vloge interakcije med molekulami pri prenosu naboja skozi prostor v pi-staknjenih molekularnih sistemih je bistveno za optimalno snovanje elektronskih materialov, vendar so kvantitativne študije težavne predvsem zaradi nezadostne kontrole morfologije molekul. Tu poročamo o uporabi koncepta ure, ki jo določa razpad notranje vrzeli z resonantno fotoemisijo pri študiju prenosa naboja s femtosekundno občutljivostjo v ciklofanah, ki so sestavljeni iz dveh precizno pi-staknjenih sistemov, ki ju skupaj držijo alifatske verige. Študirali smo [2,2] paraciklofan (22PCP) in [4,4] paracklofan (44PCP), pri katerih sta obroča razmaknjena za 0.3 nm oziroma 0.4 nm. Ugotovili smo, da je prenos naboja skozi sistem 44PCP 20krat počasnejši kot v 22PCP. Razliko pripisujemo manjši sklopitvi obročev v 44PCP. Te meritve ilustrirajo uporabo resonantne fotoemisijske spektroskopije notranjih lupin v časovni domeni kot splošno metodo za kvantifikacijo sklopitve v pi-staknjenih sistemih.
	ANG	Understanding the role of intermolecular interaction on throughspace charge transfer characteristics in pi-stacked molecular systems is central to the rational design of electronic materials. However, a quantitative study of charge transfer in such systems is often difficult because of poor control over molecular morphology. Here we use the core-hole clock implementation of resonant photoemission spectroscopy to study the femtosecond charge transfer dynamics in cyclophanes, which consist of two precisely stacked pi-systems held together by aliphatic chains. We study two systems, [2,2]paracyclophane (22PCP) and [4,4] paracyclophane (44PCP), with interring separations of 3.0 and 4.0 Å, respectively. We find that charge transfer across the pi-coupled system of 44PCP is 20 times slower than in 22PCP. We attribute this difference to the decreased interring electronic coupling in 44PCP. These measurements illustrate the use of core-hole clock spectroscopy as a general tool for quantifying throughspace coupling in pi-stacked systems.
Objavljeno v		Nature Publishing Group; Nature communications; 2012; Vol. 3; str. 1086-1-1086-7; Impact Factor: 10.015;Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.514; A'': 1;A': 1; WoS: RO; Avtorji / Authors: Batra Arunabh, Kladnik Gregor, Vázquez Héctor, Meisner Jeffrey S., Floreano Luca, Nuckolls Colin, Cvetko Dean, Morgante Alberto, Venkataraman Latha
Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek
3.	COBISS ID	27420199 Vir: COBISS.SI
Naslov	SLO	Enofotonska dvojna ionizacija notranjih lupin v C <sub>n</sub> H <sub>2n</sub> , CO in N <sub>2</sub> kot potencialno novo orodje za kemijsko analizo
	ANG	Single photon K <sup>(-2)</sup> and K <sup>(-1)</sup> K <sup>(-1)</sup> double core ionization in C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> ( <sub>2n</sub> ) (n=1-3), CO, and N <sub>2</sub> as a potential new tool for chemical analysis
Opis	SLO	Gre za primerjalno študijo, pri kateri pokažemo, da je spektroskopija K <sub>1</sub> K <sub>1</sub> na ogljikovodikih C <sub>2</sub> H <sub>2n</sub> (n = 1-3) in na molekulah N <sub>2</sub> in CO, ki jo izvedemo s koincidenčnim meritvijo med fotoelektroni ter Augerjevi elektroni, precej bolj občutljiva na dolžino in naravo vezi kot običajna nekoincidenčna spektrometrija, pri kateri opazujemo energijski premik robu preko energijskega premika fotoelektrona pri izbitju iz lupine K <sub>1</sub> . Rezultati potrjujejo veljavnost modela z izbitjem, po katerem izbiti elektron iz lupine K <sub>1</sub> izbije elektron iz lupine K <sub>1</sub> na drugem atomu v molekuli, čeprav so razmerja med procesi subtilno odvisna od elektronske gostote (vezi) med

		atomoma. V primeru CO jasno opazimo specifični Augerjev razpad takih dvolukenjskih stanj.
	ANG	We have observed single photon double Kshell photoionization in the C <sub>2</sub> H <sub>2n</sub> (n = 1–3) hydrocarbon sequence and in N <sub>2</sub> and CO, using synchrotron radiation and electron coincidence spectroscopy. Our previous observations of the K <sub>2</sub> process in these molecules are extended by the observations of a single photon double photoionization with one core hole created at each of the two neighboring atoms in the molecule (K <sub>1</sub> K <sub>1</sub> process). In the C <sub>2</sub> H <sub>2n</sub> sequence, the spectroscopy of K <sub>1</sub> K <sub>1</sub> states is much more sensitive to the bond length than conventional electron spectroscopy for chemical analysis spectroscopy based on single K-shell ionization. The cross section variation for single photon K <sub>1</sub> K <sub>1</sub> double core ionization in the C <sub>2</sub> H <sub>2n</sub> sequence and in the isoelectronic C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> , N <sub>2</sub> and CO molecules validates a knockout mechanism in which a primary ionized 1s photoelectron ejects another 1s electron of the neighbor atom. The specific Auger decay from such states is clearly observed in the CO case.
	Objavljeno v	American Physical Society; Physical review letters; 2013; Vol. 110, issue 16; str. 163001-1- 163001-5; Impact Factor: 7.728;Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.852; A'': 1;A': 1; WoS: UI; Avtorji / Authors: Nakanov M., Žitnik Matjaž
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek
4.	COBISS ID	24932647 Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO Prva detekcija prehoda vrste dva elektrona - en foton pri dvojni fotovzbuditvi lupine K z enim fotonom
	ANG	First observation of two-electron one-photon transitions in single-photon K-shell double ionization
	Opis	SLO Objavili smo eksperimentalni dokaz o obstoju koreliranega radiativnega prehoda vrste dva elektrona - en foton $1s^2 \rightarrow (2s^1)(2p^1)$ , ki sledi dvojni fotovzbuditvi lupine K v Mg, Al in Si. Stanja z dvema vrzelima v lupini K smo pripravili s sinhrotronsko svetlobo, radiativni prehod TPOE pa smo opazovali z visokoločljivostnim spektrometrom za rentgenske žarke. Določili smo energije prehoda TPOE ter njegovo jakost glede na jakost običajnega sevalnega prehoda en elektron - foton. Obe oceni smo primerjali z napovedjo teorije motenj in obstoječega računa v okviru multikonfiguracijskega modela.
	ANG	Experimental evidence for the correlated two electron - one photon transitions $1s^2 \rightarrow (2s^1)(2p^1)$ , following single-photon K-shell double ionization is reported. The double K-shell vacancy states in solid Mg, Al and Si were produced by means of monochromatized synchrotron radiation, and the TPOE radiative transitions were observed by a wavelength dispersive spectrometer. The TPOE transition energies and branching ratios were determined and compared to predictions of the perturbation theory in the configuration interaction model approach.
	Objavljeno v	American Physical Society; Physical review letters; 2011; Vol. 107, no. 5; str. 053001-1-053001-4; Impact Factor: 7.370;Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.404; A'': 1;A': 1; WoS: UI; Avtorji / Authors: Hoszowska J., Dousse J.-Cl., Szlachetko J., Kayser Y., Cao W., Jagodziński P., Kavčič Matjaž, Nowak S. H.
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek
5.	COBISS ID	28245799 Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO Visokoločljivostna multifotonska spektroskopija z energijsko nastavljivo svetlobo laserja na proste elektrone
	ANG	High resolution multiphoton spectroscopy by a tunable free-electron-laser

		light
Opis	SLO	Teoretično imajo semenski laserji na proste elektrone dovolj intenzitete in ločljivosti za izvajanje multifotonske spektrometrije atomov in molekul. S kombinacijo laserja na proste elektrone FERMI in nove detekcijske sheme smo posneli dvofotonske spektre dipolno prepovedanih dvojno vzbujenih stanj v heliju. Spektralni profili nizkoležečih resonanc $(-1,0)^+ 1Se$ in $(0,1)^0 1De$ kažejo energijske premike velikostnega reda nekaj meV, ki so odvisni od intenzitete pulza. Rezultat pojasnimo z efektivno dvonivojskim modelom, ki temelji na izračunanih Rabijevh frekvencah in razpadnih verjetnostih.
	ANG	Seeded free electron lasers theoretically have the intensity, tunability, and resolution required for multiphoton spectroscopy of atomic and molecular species. Using the seeded free electron laser FERMI and a novel detection scheme, we have revealed the two-photon excitation spectra of dipole-forbidden doubly excited states in helium. The spectral profiles of the lowest $(-1,0)^+ 1Se$ and $(0,1)^0 1De$ resonances display energy shifts in the meV range that depend on the pulse intensity. The results are explained by an effective two-level model based on calculated Rabi frequencies and decay rates.
Objavljeno v	American Physical Society; Physical review letters; 2014; Vol. 113, issue 19; str. 193201-1-193201-6; Impact Factor: 7.728; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.852; A': 1; A': 1; WoS: UI; Avtorji / Authors: Žitnik Matjaž, Mihelič Andrej, Bučar Klemen, Kavčič Matjaž	
Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek	

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

	Družbeno-ekonomski dosežek	
1.	COBISS ID	1321211 Vir: COBISS.SI
Naslov	SLO	Kompleksacija kadmija v semenih in tkivih hiperakumulatorja kadmija <i>Thlaspi praecox</i>
	ANG	Complexation of cadmium in seeds and vegetative tissues of the cadmium hyperaccumulator <i>Thlaspi praecox</i> as studied by X-ray absorption spectroscopy
Opis	SLO	Rastlina <i>Thlaspi praecox</i> Wulfen (Brassicaceae) lahko v semenih akumulira neobičajno velike količine kadmija ( $>1,000 \mu\text{g g}^{-1}$ suhe teže), ne da bi bistveno ogrozila njihovo kaljivost. Namen študije je bil dognati koordinacijo Cd atomov v semenskih vzorcih <i>T. praecox</i> in primerjava ligandov s tistimi v drugih tkivih rastline. Tehnika "Extended Xray absorption fine structure" (EXAFS) je pokazala, da sta skoraj 2/3 Cd ligandov v semenih in izoliranih embrijih v obliki tiolnih skupin (CdSC)
	ANG	The cadmium hyperaccumulator <i>Thlaspi praecox</i> Wulfen (Brassicaceae) can accumulate unusually high amounts of Cd ( $>1,000 \mu\text{g g}^{-1}$ dry weight) in its seeds without drastically affecting seed viability. The aim of this study was to investigate the Cd coordination and ligand environment in seeds of field collected <i>T. praecox</i> using extended X-ray absorption fine structure (EXAFS), and to compare the Cd ligand environment to that in the vegetative tissues of the plant. In intact seeds and isolated embryos, almost two thirds of the Cd ligands were thiol groups (CdSC).
Šifra	F.02 Pridobitev novih znanstvenih spoznanj	
	Springer; Plant and soil; 2010; Vol. 331, no. 1/2; str. 439-451; Impact Factor: 2.773; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor:	

	Objavljeno v	1.473; A'': 1; A': 1; WoS: AM, DE, XE; Avtorji / Authors: Vogel-Mikuš Katarina, Arčon Iztok, Kodre Alojz	
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek	
2.	COBISS ID	22578215	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Uporaba totalnega odboja rentgenskih žarkov v kombinaciji s kemometričnimi metodami za določanje botaničnega izvora slovenskega medu
		ANG	Application of total reflection X-ray spectrometry in combination with chemometric methods for determination of the botanical origin of Slovenian honey
	Opis	SLO	Slovenija je majhna po površini vendar podološko ter klimatsko raznolika dežela in zato ponuja odlične priložnosti za študij raznolikosti sestave naravnih produktov glede na njihovo elementni odtis. Z metodami statistične analize (PCA, RDA) pokažemo, da zadoščajo 4 katarakteristični elementi, Cl, K, Mn in Rb da ločimo med seboj različne vrste medu. Ugotovili smo, da je kombinacijo multielementne TXRF ter kemometrične metode mogoče relativno hitro, preprosto in poceni uporabiti za preučevanje botaničnega izvira raznih vrst medu.
		ANG	By employing statistical methods it was established that from all of the measured elements only the four characteristic key elements Cl, K, Mn, and Rb are sufficient to discriminate the types of honey. It was established that the employed combination of a simple, fast, and inexpensive multi-element TXRF analytical approach and the evaluation of data by chemometric methods has the potential to discriminate the botanical origins of various types of honey.
	Šifra	F.01 Pridobitev novih praktičnih znanj, informacij in veščin	
	Objavljeno v	American Chemical Society, Books and Journals Division; Journal of agricultural and food chemistry; 2009; Vol. 57, no. 10; str. 4409-4414; Impact Factor: 2.469; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 0.706; A'': 1; A': 1; WoS: AH, DW, JY; Avtorji / Authors: Nečemer Marijan, Košir Iztok Jože, Kump Peter, Kropf Urška, Korošec Mojca, Bertoncelej Jasna, Ogrinc Nives, Golob Terezija	
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek	
3.	COBISS ID	24015399	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Časovno ločljive meritve elementnih koncentracij v aerosolih v notranjih delovnih okoljih
		ANG	Time-resolved measurements of aerosol elemental concentrations in indoor working environments
	Opis	SLO	Izmerili smo elementne koncentracije v aerosolih z 2-urno časovno ločljivostjo v dveh vrstah notranjih delovnih prostorov: kemijski laboratorij in mehanska delavnica. Koncentracije v vzorcih PM10 smo določili s tehniko PIXE. Faktorska analiza je pokazala na 6-8 vektorjev (iz komponentami iz koncentracije posameznih elementov), ki opišejo večino variance za zbrano množico podatkov. Pokažemo, da je pristop z urno ločljivostjo koristen: časovno bolj podrobne meritvam utegnejo imeti premajhen potencial za identifikacijo izvirov prašenja, predolgo povprečenje pa lahko izvire spregleda.
		ANG	We have measured elemental concentrations in aerosols with a 2h time resolution in two types of working environment: a chemistry laboratory and a machine workshop. A factor analysis points to 68 factors in the chemistry laboratory and the machine workshop, respectively, that describe most of the data variance. While sampling the



		total PM10 mass concentration with a minute resolution may lack the potential to identify the emission sources in a "noisy" environment, the averaging on a day time scale is too coarse to cope with the working dynamics.
	Šifra	F.11 Razvoj nove storitve
	Objavljeno v	Pergamon; Atmospheric environment; 2010; Vol. 44, issue 38; str. 4954-4963; Impact Factor: 3.226; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 1.908; A': 1; WoS: JA, QQ; Avtorji / Authors: Žitnik Matjaž, Kastelic Andreja, Rupnik Zdravko, Pelicon Primož, Vaupetič Primož, Bučar Klemen, Novak Saša, Samardžija Zoran, Matsuyama S., Catella G., Ishii K.
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek
4.	COBISS ID	7578745 Vir: COBISS.SI
	Naslov	<i>SLO</i> Relevanca prostorsko razločenih elementnih profilov pšeničnih ( <i>Triticum aestivum</i> ) zrn za prehransko znanost
		<i>ANG</i> Relevance for food sciences of quantitative spatially resolved element profile investigations in wheat ( <i>Triticum aestivum</i> ) grain
	Opis	<i>SLO</i> Pomembno delo za področje prehranske industrije in procesiranja hrane, ki analizira efekte rasti pšenice v s cinkom bogati prsti. Poleg povečanja vsebnosti določenih elementov v zrnju (Ca, Fe, Zn) in zmanjšanja drugih (Na, P, Mo), pride pri rasti glede na normalne razmere do prostorske prerazporeditve elementov, kar je lahko pomembno spremeni razmerja med elementi, ki se odstranijo v toku mletja in poliranja zrnja.
		<i>ANG</i> Bulk element concentrations of whole grain and element spatial distributions at the tissue level were investigated in wheat ( <i>Triticum aestivum</i> ) grain grown in Zn-enriched soil. Inductively coupled plasma mass spectrometry and inductively coupled plasma optical emission spectrometry were used for bulk analysis, whereas microproton-induced X-ray emission was used to resolve the twodimensional localization of the elements. Soil Zn application did not significantly affect the grain yield, but did significantly increase the grain Ca, Fe and Zn concentrations, and decrease the grain Na, P and Mo concentrations; bulk Mg, S, K, Mn, Cu, Cd and Pb concentrations remained unchanged. These changes observed in bulk element concentrations are the reflection of tissuespecific variations within the grain, revealing that Zn application to soil can lead to considerable alterations in the element distributions within the grain, which might ultimately influence the quality of the milling fractions. Spatially resolved investigations into the partitioning of the element concentrations identified the tissues with the highest element concentrations, which is of utmost importance for accurate prediction of element losses during the grain milling and polishing processes.
	Šifra	F.04 Dvig tehnološke ravni
	Objavljeno v	The Royal Society; Journal of the Royal Society interface; 2013; Vol. 10, no. 84; str. 1742-5662; Impact Factor: 3.856; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.663; A': 1; WoS: RO; Avtorji / Authors: Pongrac Paula, Kreft Ivan, Vogel-Mikuš Katarina, Regvar Marjana, Germ Mateja, Vavpetič Primož, Grlj Nataša, Jeromel Luka, Eichert Diane, Budič Bojan, Pelicon Primož
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek
5.	COBISS ID	3284475 Vir: COBISS.SI
	Naslov	<i>SLO</i> Študij baterije Li-S in njenih komponent z jedrsko magnetno resonanco in rentgensko absorpcijsko spektroskopijo
		<i>ANG</i> X-ray absorption near-edge structure and nuclear magnetic resonance

		study of the lithium-sulfur battery and its components
Opis	SLO	Gre za pomembno področje študija zmogljivih baterij, ki smo mu v letu 2013 namenili več raziskovalne pozornosti kot prej. Čeprav bo prispevek objavljen v letu 2014, je bil članek pripravljen za objavo že sredi leta 2013. V njem prikazani rezultati so sprožili dodatne poskuse, ki smo jih konec leta 2013 izvajali na sinhrotronu ESRF (Grenoble) in s katerimi smo poskušali še izboljšati občutljivost strukturnih analiz preko meritve neelastičnega resonančnega sipanja rentgenske svetlobe. Na osnovi testnih meritev smo že pripravili resen eksperimentalni projekt, ki je bil poslan na ESRF na zadnjem razpisu merilnega časa. Gre za spremljanje koncentracije polisulfidnih verig LiSx različnih dolžin, ki se tvorijo v elektrolitu v različnih fazah delovanja baterije in določajo njene lastnosti. Absorpcijska spektrometrija in jedrska magnetna resonanca sta dragoceni analitski metodi s katerima je mogoče spremljati lokalno okolico atomov S v baterijah, tudi med delovanjem.
	ANG	Understanding the mechanism(s) of polysulfide formation and knowledge about the interactions of sulfur and polysulfides with a host matrix and electrolyte are essential for the development of long-cycle-life lithium-sulfur (Li-S) batteries. To achieve this goal, new analytical tools need to be developed. Herein, sulfur K-edge X-ray absorption near-edge structure (XANES) and <sup>6,7</sup> Li magic-angle-spinning (MAS) NMR studies on a Li-S battery and its sulfur components are reported. The characterization of different stoichiometric mixtures of sulfur and lithium compounds (polysulfides), synthesized through a chemical route with all-sulfur-based components in the Li-S battery (sulfur and electrolyte), enables the understanding of changes in the batteries measured in post-mortem mode and in operando mode. A detailed XANES analysis is performed on the different battery components (cathode composite, and separator). The relative amounts of each sulfur compound in the cathode and separator are determined precisely, according to the linear combination fit of the XANES spectra, by using reference compounds. Complementary information about the lithium species within the cathode are obtained by using <sup>7</sup> Li MAS NMR spectroscopy. The setup for the in operando XANES measurements can be viewed as a valuable analytical tool that can aid the understanding of the sulfur environment in Li-S batteries.
Šifra	F.06	Razvoj novega izdelka
Objavljeno v	Wiley-VCH; ChemPhysChem; 2014; Vol. 15, no. 5; str. 894-904; Impact Factor: 3.360; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.414; A': 1; WoS: EI, UH; Avtorji / Authors: Ubrani M. Manu Patel, Arčon Iztok, Aquilanti Giuliana, Stievano Lorenzo, Mali Gregor, Dominko Robert	
Tipologija	1.01	Izvirni znanstveni članek

## 8. Drugi pomembni rezultati programske skupine<sup>2</sup>

V priloženi datoteki z imenom odobreni\_projekti.pdf je naštetih 87 IZVEDENIH projektov na sinhrotronih v obdobju 2009 - 2014, pri katerih so predlagatelji ali sopedlagatelji člani raziskovalnega programa P1-0112. Žarkovni čas financira EU, države članice (velja le za ESRF) ali posamezne nacionalne agencije za raziskave.

V isti prilogi je naštetih 23 IZVEDENIH TNA (Trans National Access) projekti, na osnovi katerih so v obdobju 2009-april 2014 tuji raziskovalci izvajali meritve z ionskimi žarki v Mikroanalitskem centru IJS v okviru EU povezave SPIRIT.

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

### 9.1. Pomen za razvoj znanosti<sup>2</sup>

SLO

Pomen programskih rezultatov za razvoj znanosti je neposreden in posreden. V prvem primeru gre za raziskave obnašanja atomov in molekul pri velikih intenzitetah svetlobe na energijskem področju EUV (rezonančna multifotonska absorpcija, superfluorescenca) ter za opazovanje šibkih koreliranih procesov, ki so pomembni s stališča fizike več teles v Coulombskih sistemih (večdelčni elektronski prehodi v atomih, preureditve fragmentov pri disociaciji molekul). V drugem primeru gre za prilagoditev, kombiniranje in uvajanje novih eksperimentalnih tehnik, s katerimi je potem mogoče pogledati na določen problem pri analizi materialov na nekoliko drugačen ali na povsem nov način. Taki novi podatki, še posebej, če so izmerjeni in-situ ali in-operando, so lahko fundamentalnega pomena za tistega, ki materiale sintetizira. S svetlimi viri sinhrotronske svetlobe dosežemo z lastnim visokoločljivim spektrometrom za mehke rentgenske žarke odlične rezultate. Rezultati so pomembni za razvoj znanosti, saj poročajo o osnovnih fizikalnih fenomenih (separacija dvojno vzbujenih stanj, nelinearni Ramanski in interferenčni efekti) z doslej najostrejšimi spektroskopskimi slikami. Širok nabor eksperimentalnih pristopov združen z ekspertno simulacijo omogoča "totalni" študij določene problematike. Lep primer prednosti takega pristopa je preučevanje odziva kloroogljikovodikovih molekul pri tvorbi vrzeli v notranji lupini: tako smo opazovali sevalni in nesevalni razpad z vrzeljo K v atomu klora z meritvami fotoabsorpcije ter RIXS (ESRF), in posebej HAXPES (SOLEIL), opazovali smo Augerjev razpad vrzeli L, pri čemer smo izmerili še totalni ionski pridelek ter masne spektre v odvisnosti od energije vzbujanja (MAXLAB2). Nazadnje smo opazovali ionske fragmente v koincidenzi z Augerjevimi elektroni (tehnika PEPICO), predvideno pa so še meritve razpada vrzeli KL z magnetno steklenico (SOLEIL). Pričakovani rezultati s področja ultrahitre dinamike naboja ob nanometričnih hibridnih stikih bodo osvetlili vlogo (i) ujemanja elektronskih nivojev, (ii) jakosti sklopitev funkcionalnih skupin, (iii) prostorske konfiguracije in geometrije hibridne sklopitve, in (iv) prekrivanja stičnih orbital na hitrost in smer transporta naboja. Izsledki s področja povratne dinamike naboja bodo poleg izsledkov statičnega prenosa naboja in hibridizacije molekulskih stanj ter tvorbe mejne dipolne plasti ob hibridnih molekulskih stikih ponudili dodaten vpogled v zmožnosti za transport naboja preko nezasedenih molekulskih orbital. Širitev uporabe metode CHC na merjenje ultrahitre dinamike povratnih elektronov na akceptorske molekule je novost, ki bi lahko postala novo močno orodje za študij transportnih pojavov ob molekulskih stikih. Dobljeni rezultati bodo omogočili boljše načrtovanje novih, na organskih sestavih temelječih elektronskih komponent. Rtg. absorpcijska spektroskopija (XAS) z metodama EXAFS in XANES je nepogrešljivo orodje pri razvoju novih (nano)materialov z želenimi lastnostmi. Primer je karakterizacija atomske strukture in elektrokemijskih procesov v katodnem materialu na delujoči Li-ionski ali Li-žveplovi bateriji med polnjenjem in praznjenjem. Dobljeni rezultati so lahko ključni za optimiranje sinteze novih katodnih materialov za doseganje čim večjih kapacitet baterije s še višjo energijsko gostoto in za dolgoročno stabilnost njihovega delovanja. Podobni so cilji in pomen "in-situ" raziskav EXAFS in XANES pri katerih bomo določali strukturne parametre (valenco, mesto vgradnje in lokalno strukturo) različnih kovinskih kationov, ki ključno uplivajo na katalitske lastnosti mikro in mezoporoznih molekularnih sit in zeolitov. XAS bomo izkoriščali tudi za karakterizacijo lokalne strukture dopantov v kristaliničnih materialih in določanju njihove vloge pri zagotavljanju zelene funkcionalnosti feroelektrične in feromagnetne keramike, kjer standardne strukturne tehnike (npr. XRD) popolnoma odpovedo.

ANG

The scientific importance (relevance) of the programme research results is twofold: direct and indirect. In the first case we deal with explicit studies of atomic and molecular behavior in the presence of intense and coherent EUV light (resonant multiphoton absorption, superfluorescence) and with the observations and characterization of weak (rare) transitions which reveal correlation mechanisms that are of interest for a few body physics of Coulomb systems (multielectron transitions, fragment rearrangement in molecular dissociation). The second case is based on adjustment, combination and introduction of new experimental techniques that offer a fresh or a completely new look on a specific problem in the field of material analysis. The data set obtained that way, especially if taken in the in-situ or in-operando mode, can be of fundamental importance for people synthesizing or using the material. With bright synchrotron light sources we have recently obtained excellent results with our high resolution X-ray spectrometer. The emerging results are important for development of the science since they enable an insight into the fundamental physical phenomena (separation of doubly excited states, nonlinear Raman and interference effects, Radiative Raman effect)

with so far the sharpest spectroscopic images. Another advantage is wide selection of synchrotron and ion-beam techniques that have found an expertise in our research programme. This allows for the "total" study of a certain problematic as shown, for example by our research on chlorohydrocarbon's response to creation of an inner core hole: for a group of compounds we have measured the chlorine K-shell photoabsorption and RIXS signal (ESRF) and the HAXPES signal (SOLEIL). We have also measured L-VV Auger spectra, the total ion yield and the mass spectra upon L-shell formation as a function of excitation energy (MAXLAB2) and also ionic fragments in coincidence with the Auger electrons (MAXLAB) well as mass spectrometry. For these molecules we plan to investigate the formation of a double KL core by the magnetic bottle spectrometer (SOLEIL).

Systematic measurements of charge transfer (CT) dynamics in different molecule/substrate systems, are expected to identify relevant molecule-substrate coupling parameters such as adsorption geometry (angle, distance), adsorption energy, energy level alignment, from the substrate transport characteristics which determine the rate and direction of electron transfer through the hybrid interfaces. In addition to studying static CT to acceptor molecules via hybridization and charge dipole formation at the hybrid interfaces, the expected results on dynamic backtransfer will provide additional insight on molecular capabilities to transport electrons over empty molecular orbitals. The possibility to exploit CHC method for ultrafast charge backtransport to acceptor molecules promises to become a powerful tool in studying electronic structure at hybrid interfaces. The obtained results will allow a better understanding of fundamental electronic properties of molecular nanoassemblies that will lead to a better, knowledge based design of novel organic based components for organic electronics. X-ray absorption spectroscopy (XAS) with EXAFS and XANES techniques is indispensable tool for development of new functional (nano) materials with desired properties. An example is in-operando characterization of atomic structure and electrochemical processes in cathode materials of Li-ion or Li-sulphur battery during charging and discharging. Obtained results are crucial for development of new cathode materials with higher energy density and long term stability. Similar goals are followed in the "in-situ" EXAFS and XANES research of catalytic properties of different micro and mesoporous catalysts and zeolites, where crucial structural and chemical parameters of incorporated metal cations (site of incorporation, valence state, local structure) are monitored.

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

SLO

V sklopu raziskav EXAFS, XANES, RIXS, XRS z rentgenskimi žarki ter analitičnih metod z ionskimi žarki: PIXE, RBS, ERDA, NRA, PIGE ter SIMS skupaj z njihovimi mikro- različicami, omogočamo različnim slovenskim (in tujim) laboratorijem s področij materialov, geologije, sintezne kemije, farmakologije, biologije, vakuumske tehnike, raziskav okolja in ohranjanja kulturne dediščine dostop do moderne merilne tehnologije s sinhrotronsko svetlobo in ionskimi žarki. Meritve izvajamo v sinhrotronskih laboratorijih ELETTRA, ESRF, DESY ter v Mikroanalitskem Centru IJS ter pri tem uporabljamo velik del lastne eksperimentalne opreme. Doslej smo tako sodelovali pri razvoju več tehnološko pomembnih materialov, kot so npr. baterije, mikroporozni katalizatorji, supraprevodne in feroelektrične keramike, surfaktanti, zaščitne in samočistilne prevleke, nanostrukturni materiali in nekatere farmakološko pomembne makromolekule, pa tudi pri razvoju digitalne procesne elektronike. Z intenzivno prisotnostjo na evropskih sinhrotronih ter z uspešnimi obiski tujih raziskovalcev v Mikroanalitskem centru IJS se krepi mednarodno sodelovanje. Tako smo v obdobju 2009-2014 skupaj s sodelavci izvedli več kot 81 sinhrotronskih projektov ter gostili 23 TNA (trans-national-access) projektov na ionskem pospeševalniku v MIC IJS. Kontinuirana prisotnost v mednarodnih centrih raziskav, udeležba na odmevnih mednarodnih srečanjih ter priprava konferenc (BioPIXE 2014) omogočajo kvalitetno in kontinuirano delo, dostop do tujih znanj ter posredno prinašajo ugled Sloveniji. Uveljavljena eksperimentalna skupina iz enega laboratorija sodeluje z uveljavljeno skupino teoretikov iz druge institucije; pri aplikativnih raziskavah material pogosto sintetizira ena skupina, več drugih skupin pa izvede meritve, ki material z različnimi tehnikami karakterizirajo: tako mednarodno delitev dela stalno srečujemo pri našem delu. Poleg direktne udeležbe članov našega programa pri poučevanju študentov na fakultetah, je pogost dostop do sinhrotronov in do ionskega pospeševalnika prav tako pomemben s pedagoškega vidika, zaradi seznanjanja študentov naravoslovja z množico različnih eksperimentalnih tehnik, ki so tu v

uporabi. Vsebine iz področja sinhrotronskih merilnih tehnik in analitičnih metod s pospešenimi ioni so vključene v visokošolske programe na dodiplomskem in podiplomskem nivoju. Študentje imajo možnost pridobivanja izkušenj z neposrednim sodelovanjem pri meritvah ter analizah. Program nudi možnost za usposabljanje slovenskih raziskovalcev na področju uporabe sinhrotronske svetlobe v fiziki površin in novih materialov in s tem prenos znanja in visoke tehnologije v domače raziskovalne institucije in v industrijo. Plod uspešnega sodelovanja s Kemijskim inštitutom in centrom odličnosti CO NOT je razvoj novih nanostrukturiranih katodnih materialov za litij-žveplove baterije. Nove Li-S baterije (EUROLIS – FP7 EU project) največ obetajo pri pogonu električnih avtomobilov, ker naj bi velika gostota shranjene energije zagotavljala 500 km avtonomije. XAS analiza valence in atomskih okolic žvepla med obratovanjem baterije je razkrila elektrokemično dinamiko baterije in pripomogla k prizadevanjem za optimizacijo njene kapacitete. Udeležba pri raziskavah v zvezi s fuzijo ter s svetlobo laserja na proste elektrone omogoča stik z najnaprednejšimi tehnologijami, ki se uporabljajo pri konstrukciji tokamaka ITER ter izvirov FEL. Te tehnologije bodo v naslednji fazi uporabljene pri komercializaciji, hkrati pa nudijo možnosti za sprotni spin-off. Pri metodiki vzorčevanja in določanju elementnih koncentracij z ionskim žarkom v aerosolih smo v preteklosti dosegli konkretne rezultate. Po raziskavah v zvezi s problemom prašenja znotraj bivanjskih in delovnih prostorov (delavnice, produkcijski obrati), kjer so dihalne obremenitve za ljudi velikokrat večje kot prostem, razvijamo problematiko z meritvami prašenja v telovadnicah.

ANG

Our expertise with x-rays (EXAFS, XANES, RIXS, potentially XRS) and ion beam methods (PIXE, RBS, ERDA, NRA, PIGE and SIMS) together with their micro- versions allows Slovenian and foreign laboratories working in the field of material research, geology, chemical synthesis, pharmacology, biology, vacuum technology, environmental research, cultural heritage preservation, etc, to approach modern analytical methods with synchrotron light and ion beams. Our application-oriented measurements were and will be performed at synchrotron research centers like ELETTRA, ESRF, DESY and at the ion beam facility Mikroanalytical Center JSI where mostly our own instrumentation is being used. We participated in the development of several technologically important materials, such as batteries, microporous catalysts, superconducting and ferroelectric ceramics, surfactants, thin layer and self-cleaning coatings and some pharmaceutical molecules, and we helped in a development of a digital processing electronics. We are active in solving the environmental problems due to pollution with heavy metals, pesticides and biological agents, and in preservation of the cultural heritage. Our intensive presence at European synchrotron centers and successful visits of researchers from abroad at MIC IJS are strengthening the international scientific collaboration. In 2009-2014 period we have performed with collaborators altogether 81 officially assigned synchrotron projects and have hosted 23 TNA (Trans-National-Access) projects at ion accelerator centre MIC JSI. Our presence in the international research centers, at international workshops and conferences allows for a research work of an enduring quality, the access to the foreign knowledge and indirectly, a generation of a positive image of Slovenia. The experimental research group from one lab collaborates with a group of theoreticians from the other institute, or, material synthesized by one group is characterized by several other groups using different techniques: such an international division of work is constantly met at our work. Besides direct teaching duties that our researchers are executing at different faculties, from pedagogical point of view also a regular access to the synchrotron and ion accelerator beamlines is important to demonstrate to students a wealth of existing experimental approaches. These techniques are also presented in a number of academic programs at the undergraduate or graduate level. The students can gain knowledge about modern analytical techniques with synchrotron light and ion beams by direct involvement in our experiments or/and by participation in the data analysis. The program equally provides an opportunity for Slovene scientists to gain experience in the surface and material sciences and transfer the high-technology know-how to the research and industrial labs. The development of ferroelectric thin layers, catalysts, new battery materials, and self-cleaning coatings are just a few examples of economically interesting, market-oriented applications. In a particularly fruitful, long term collaboration with Institute of Chemistry and CO NOT new nanostructured cathode materials for Li-sulphur batteries have been developed. Li-S batteries (EUROLIS – FP7 EU project) are most promising for electric cars, since they are expected to provide the car autonomy of 500 km. The XAS analysis of valence and atomic neighborhood of sulphur during battery operation shed light into the electrochemical dynamics and helped to optimize the capacity. Our involvement with setting up a fusion reactor and in the

free-electron-laser related research allows, in principle, the contact with the most advanced technologies, which, in the next phase, will be commercialized offering an opportunity for the spin-off activities. We are actively collaborating in finding the solutions for the environment reconstruction due to the heavy metal and dust pollution.

## 10. Zaključena mentorstva članov programske skupine pri vzgoji kadrov v obdobju 1.1.2009-31.12.2014<sup>11</sup>

### 10.1. Diplome<sup>12</sup>

vrsta usposabljanja	število diplom
bolonjski program - I. stopnja	1
bolonjski program - II. stopnja	2
univerzitetni (stari) program	18

### 10.2. Magisterij znanosti in doktorat znanosti<sup>13</sup>

Šifra raziskovalca	Ime in priimek	Mag.	Dr.	MR	
0	Nebojša Topič	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="checkbox"/>	
25624	Sabina Markelj	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	
29054	Nataša Grlj	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	
29515	Gregor Kladnik	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	
33312	Rok Bohinc	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	
33262	Iuliia Mikulska	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	
37782	Mitja Kelemen	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="checkbox"/>	

Legenda:

**Mag.** - Znanstveni magisterij

**Dr.** - Doktorat znanosti

**MR** - mladi raziskovalec

## 11. Pretok mladih raziskovalcev – zaposlitev po zaključenem usposabljanju<sup>14</sup>

Šifra raziskovalca	Ime in priimek	Mag.	Dr.	Zaposlitev	
25624	Sabina Markelj	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	A - raziskovalni zavodi	
29054	Nataša Grlj	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	C - Gospodarstvo	
29515	Gregor Kladnik	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	A - raziskovalni zavodi	
33312	Rok Bohinc	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	E - Tujina	
33262	Iuliia Mikulska	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	C - Gospodarstvo	

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	
0	Luis Miguel Rodriguez	D - podoktorand	3	
0	Antti Kettunen	C - študent – doktorand	1	
0	Ebrahim Gholami Hatam	C - študent – doktorand	6	
35170	Nina Ogrinc Potočnik	A - raziskovalec/strokovnjak	25	
0	Zdravko Siketić	C - študent – doktorand	12	
0	Aleksandra Wandzilak	C - študent – doktorand	3	
0	Marko Peric	C - študent – doktorand	15	

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 1.1.2009-31.12.2014<sup>15</sup>**

SLO

2009-2013 SPIRIT 227012, FP7 Infrastructures20081, "Podpora javnim in industrijskim raziskavam s tehnologijo ionskih žarkov".

2011-2015 SUNGREEN FP7 RegPot. "Dviganje raziskovalnega potenciala Univerze v Novi Gorici na področju okoljskih znanosti in novih nanomaterialov".

EUROATOM

1.4.1. FU, "Procesi z nevtralnimi atomi in molekulami vodika".

1.4.3. FU, "Uporaba ionski analiznih metod za študij interakcije plazme s steno v tokamakih".

1) "Mobilnost interakcije molekul H<sub>2</sub> in D<sub>2</sub> s stenami".

2) "Uporaba analitičnih metod z ionskimi žarki pri študiju mobilnosti interakcije med plazmo in stenami".

3) "Porazdelitev zadrževanja devterija z metodo mikro-NRA (WP10PWI0102/MHEST/PSb).

4) "Zadrževanje goriva v materialih predvidenih za ITER" (WP11PWI010101/MHEST/PS).

5) "Analiza zadrževanja devterija v mešanih materialih", (WP13IPHA01P301/MESCS/PS v sodelovanju z INFLPR, Bukarešta, Romunija),

6) "Interakcija atomov in nizkoenergijske vodikove plazme s poškodovanim volframom",

(WP13IPHA03P101/MESCS/PS v sodelovanju z IPP, Garching, Nemčija),

7) "D readsorpcija/resaturacija s površin W izpostavljenih helijevi RF-razelektrivni

kot tehniki za odstranjevanje goriva", (WP13IPHA03P201/MESCS/PS v sodelovanju s PIIM, Univ. AixMarseille, Francija).

8) Fusion Expo aktivnosti, EFDA, Fusion Expo.

2012- SPRITE: "Podpora odličnosti podiplomskih raziskav preko sodelovanja z industrijo", MarieCurie štipendija.

2008-2012: COST akcija CM0702 "Kemija z ultrakratkimi pulzi in laserji na proste elektrone: iskanje kontrolnih strategij z natančnimi izračuni" (CUSPFEL):

1) Krajša znanstvena misija (STSM): 1. 2. - 30. 4. 2009 (dr. A. Mhelič).

2) Delavnica, Dresden, Nemčija (23. - 27.11. 2009): "Ultrahitna dinamika v končnih atomskih in molekularnih sistemih z novimi izviri svetlobe" (dr. Andrej Mihelič).

2009-2013: COST akcija CM0805 " Kemično vesolje: Razumevanje kemije v astronomskem okolju", (dr. Iztok Čadež je bil predstavnik Slovenije v Management Committee)

2013-2017: COST akcija CM1204: "Svetloba XUV/X in hitri ioni za hitro kemijo (XLIC)" (prof. dr. M. Žitnik je predstavnik Slovenije v Management Committee).

Mednarodni bilateralni projekti:

1) BIAL/0809003 "Optimizacija prenosnega rentgensko fluorescenčnega analizatorja.",

Slovenija-Albanija (dr. Peter Kump).

2) BIRS/0809028 "Fragmentacija organskih molekul...", Slovenija-Srbija (dr. Iztok Čadež).

3) BIJPN/070902 "Uporaba protonskega mikrožarka...", Slovenija-Japonska (prof.dr. Primož Pelicon).

4) BIIT/1113011: "Dinamika na nanometerski skali." (prof.dr. Matjaž Žitnik)

6) BIFR/14-15 "Tvorba večkratnih vrzeli v notranjih lupinah s fotoni ali protoni" (prof.dr. Matjaž Žitnik)

7) CEA: Q20004/ 100011340004: "Meritve in kontrola koncentracije devterija v fuzijskih materialih." (prof. dr. Primož Pelicon)

Projekti IAEA:

1) "He Irradiated Tungsten and Alloys for PFC", 18145/R0, IAEA- International Atomic Energy Agency.

2) "Application of Synchrotron Radiation in Studies of Environmental Impact", RC 18186/R0, IAEA- International Atomic Energy Agency.

3) "Techniques using MeV Focussed Ion Beams", RC 18353/R0, IAEA- International Atomic Energy Agency.

4) "Improvement of the XRF Quantification", NO.13858, IAEA- International Atomic Energy Agency.

**14.Vključenost v projekte za uporabnike, ki so v obdobju trajanja raziskovalnega programa (1.1.2009–31.12.2014) potekali izven financiranja ARRS<sup>16</sup>**

SLO

1) "Analiza aerosolnih vzorcev po pogodbi U1BLF258/09, UPPINT-Primorski Institut za Naravoslovne in Tehnične



vede (dr. M. Žitnik).

- 2) "Installation of XRF Programme for Quantitative Evaluation", MDH 089/2009, .A.S.A. Abfallservice Halbenrain (dr. P. Kump).
- 3) "Svetovanje in kalibracija elementov WDXRF vzorcev", S00820, Cinkarna Celje d.d. (dr. P. Kump)
- 4) "Determination of Trace Elements in Lu Foil by k0-INAA and XRF", IRMM.B062045, Institute for Reference Materials and Measurements (dr. p. Kump).
- 5) "XRF kvalitativne in kvantitativne analize", 3000074673, Domači kupci (dr. P. Kump).
- 6) "Servis merilnika gostotnih profilov", 039-67/2011, Univerza v Ljubljani (mag. Z. Rupnik).
- 7) "Razvoj digitalnega pulznega procesorja", U1-BL-F2-75/08, Instrumentation Technologies, d.d.(dr. P. Pelicon).
- 8) "Industrijske raziskave za firmo Pankl Engine Systems Gmbh & Co. KG" (08543432,09509812) (dr. P. Pelicon).

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

SLO

Poleg temeljnih raziskav na področju atomske in molekularne fizike ter fizike površin je pomembno poslanstvo raziskovalnega programa razvoj in posredovanje modernih analitičnih tehnik s sinhrotronsko svetlobo in ionskimi žarki potencialnim uporabnikom doma in v tujini, ki morajo pri svojih raziskavah podrobno spoznati zgradbo materialov in njihov odziv pri različnih pogojih delovanja. Če razumemo tehnološko zrelost rezultatov programa in njihovo implementacijo v praksi kot takšen servis za uporabnike, potem je program tehnološko zrel, saj promptno sledi in razvija nove analitične tehnike, s katerimi pomaga uporabnikom v praksi, kot kaže veliko število zgoraj naštetih primerov. Pri tem gre tudi za vzdrževanje tehnične opremljenosti ionskega pospeševalnika in eksperimentalnih postaj na ustrezno visokem nivoju, kakor tudi za preučevanje novih možnosti na sodobnih virih sinhrotronske in laserske svetlobe.

#### 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	<input checked="" type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
potrebni finančni vložek	500.000 EUR
ocena potrebne infrastrukture in opreme <sup>18</sup>	Ion beam micromachining

#### 17. Izjemni dosežek v letu 2014<sup>19</sup>

##### 17.1. Izjemni znanstveni dosežek

"Visokoločljivostna multifotonska spektroskopija z laserjem na proste elektrone".  
M.Žitnik et al. Physical Review Letters 113, 193201 (2014)

Kratkotrajni in močni svetlobni pulzi laserja na proste elektrone so tudi spektralno selektivni, tako da jih je načeloma mogoče uporabiti za izvajanje multifotonske spektrometrije atomov in molekul na energijskem področju V(X)UV. Skupina mednarodno uveljavljenih raziskovalcev z

našimi raziskovalci na čelu je na laserju na proste elektrone FERMI vpeljala novo detekcijsko shemo, s katero smo prikazali spektroskopski potencial novih virov svetlobe v praksi. Z enim od prvih odobrenih poskusov na novi napravi smo posneli dvofotonske vzbuditvene spektre dipolno prepovedanih dvojno vzbujenih stanj v heliju. Opažanja v zvezi s fundamentalno dvofotonsko amplitudo za tvorbo koreliranih dvoelektronskih stanj smo pojasnili z učinkovitim dvonivojskim modelom, ki temelji na izračunanih Rabijevih frekvencah in razpadnih verjetnostih.

## 17.2. Izjemni družbeno-ekonomski dosežek

2009-2013 SPIRIT 227012, FP7 Infrastructures20081,"Podpora javnim in industrijskim raziskavam s tehnologijo ionskih žarkov".

S projektom SPIRIT smo se vključili v vseevropsko povezavo ionskih pospeševalnikov, ki je tujim raziskovalcem omogočila gostovanje na naših eksperimentalnih postajah. Tako smo z ionskim pospeševalnikom Tandetron (Mikroanalitski Center IJS) realizirali kar 23 različnih poskusov, ki so jih predlagali in izvedli raziskovalci iz drugih evropskih držav. Velik interes za izvajanje TNA projektov (TransNational Access) je dokaz visokega nivoja domače eksperimentalne opreme in temu primerne znanja domačih raziskovalcev. SPIRIT, ki je postavil našo veliko infrastrukturno opremo na evropski zemljevid, je pomemben tudi zato, ker je ena od redkih aktivnosti, ki ji je uspelo delno kompenzirati močan tok v nasprotni smeri: pri tem mislimo na plodno delo, ki ga številni domači raziskovalci izvajajo v tujih raziskovalnih centrih (sinhrotroni).

## 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):*

in

*vodja raziskovalnega programa:*

Institut "Jožef Stefan"

Matjaž Žitnik

**ŽIG**

Kraj in datum:

Ljubljana

13.3.2015

**Oznaka poročila: ARRS-RPROG-ZP-2015/125**

<sup>1</sup> 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](#)

<sup>2</sup> 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](#)

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

<sup>4</sup> 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](#)

<sup>5</sup> 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](#)

<sup>6</sup> 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](#)

<sup>7</sup> 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](#)

<sup>8</sup> 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](#)

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

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

<sup>11</sup> 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](#)

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

<sup>13</sup> 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](#)

<sup>14</sup> 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](#)

<sup>15</sup> 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](#)

<sup>16</sup> 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](#)

<sup>17</sup> 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](#)

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

<sup>19</sup> 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/>, predstavitev dosežkov za pretekla leta pa so objavljena na spletni strani <http://www.arrs.gov.si/sl/analyze/dosez/>. [Nazaj](#)

Obrazec: ARRS-RPROG-ZP/2015 v1.00b  
41-69-70-B9-A8-FA-0E-EA-AA-4B-41-8F-D2-06-E7-BC-39-CB-2B-50

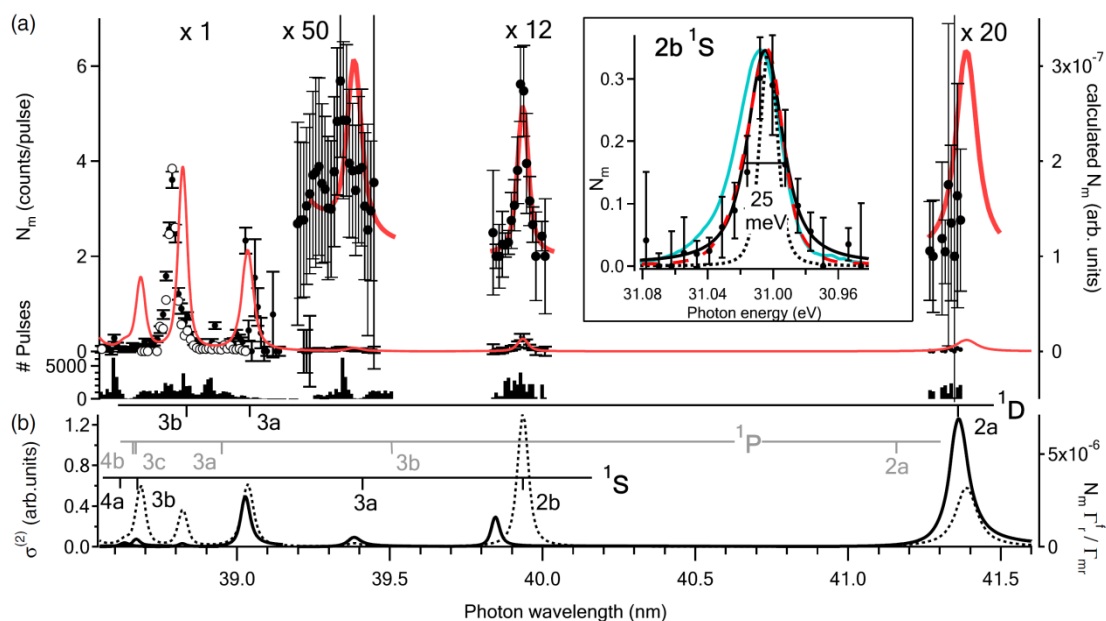
## **Priloga 1**

# VEDA: Naravoslovje

## Področje: 1.02 Fizika

**Dosežek:** Visokoločljivostna multifotonska spektroskopija z laserjem na proste elektrone .

Vir: M.Žitnik et al. *Physical Review Letters* **113**, 193201 (2014)



Kratkotrajni in močni svetlobni pulzi laserja na proste elektrone so tudi spektralno selektivni, tako da jih je v principu mogoče uporabiti za izvajanje multifotonske spektrometrije atomov in molekul na energijskem področju V(X)UV. Skupina mednarodno uveljavljenih raziskovalcev z našimi raziskovalci na čelu je na unikatnem semenskem laserju na proste elektrone FERMI vpeljala novo detekcijsko shemo z atomi v metastabilnih stanjih, s katero smo prikazali spektroskopski potencial novih močnih virov svetlobe v praksi. Z enim od prvih odobrenih poskusov na novi napravi smo posneli dvofotonske vzbuditvene spektre dipolno prepovedanih dvojno vzbujenih stanj v heliju: spektralni profili nizkoležečih resonanc simetrije  $1S^e$  in  $1D^e$  kažejo energijske premike velikostnega reda nekaj meV, ki so odvisni od intenzitete vpadne svetlobe. Opažanja v zvezi s fundamentalno dvofotonsko amplitudo za tvorbo koreliranih dvoelektronskih stanj smo pojasnili z efektivnim dvonivojskim modelom, ki temelji na izračunanih Rabijevih frekvencah in razpadnih verjetnostih.

Vpeljali smo novi način večfotonske spektroskopije, ki je omejen izključno z ločljivostjo novega vira svetlobe in nanj ne vpliva morebitna dodatna dodatna energijska razmazanost spektrometrov. Konkretni rezultati v zvezi s helijevim atomom, ki je prototip za korelirani kvantni sistem, so omogočili potrditev prej predlaganih teoretskih obravnav amplitude za dvofotonsko fotoabsorpcijo v tem fundamentalnem sistemu.

## **Priloga 2**

Spodaj je naštetih 81 IZVEDENI projektov **na sinhrotronih** v obdobju 2009 - april 2014, pri katerih so predlagatelji ali sopredlagatelji člani raziskovalnega programa P1-0112. Žarkovni čas financira EU, države članice (velja le za ESRF, Slovenija ni članica) ali posamezne nacionalne agencije za raziskave.

- 1)** ELETTRA (XAFS), In situ XAS studies of high energy density cathode materials for Li-ion batteries (20085196), 2.4. do 7.4. 2009,
- 2)** ESRF, Grenoble, HD 370 "Atomic xray absorption in Ba and Sr", 23. 6. do 30. 6. 2009,
- 3)** HASYLAB, DESY v Hamburgu (žarkovne linije A1 in C), II20080058EC "XAS analysis of transition metals in leadfree piezoelectric thin films and in catalysts based on porous silicates", 13. 5 do 20. 5. 2009,
- 4)** ELETTRA (XAFS), Multielectron photoexcitations in noble gases Xe and Ar ("in house" merilni čas), 14. 9. do 18. 9. 2009,
- 5)** HASYLAB, DESY v Hamburgu (žarkovne linije A1 in C), II20080058EC "XAS analysis of transition metals in lead-free piezoelectric thin films and in catalysts based on porous silicates", 19. 10 do 26. 10. 2009,
- 6)** ELETTRA (Nanospectroscopy), Electronic structure of graphene single layer (20085306), 2.2.2009, 15 x 8 ur,
- 7)** ELETTRA (ALOISA), Cysteamine mediated charge transport at organometallic interfaces (20085385), 12.1.2009, 15 x 8 ur,
- 8)** ELETTRA (ALOISA), Local Structure of CobaltTetraphenylporphyrin on Ag(111) and Au(111) surfaces (20085221), 9.2.2009, 20 x 8 ur,
- 9)** ELETTRA (ALOISA), Structural and chemical transformation of Lmethionine biomolecular selfassembly, (20085345), 12.5.2009, 15 x 8 ur,
- 10)** ELETTRA (ALOISA), Understanding of 4,4'Diaminoazobenzene on Gold: Looking for the Evidence of a Fano Resonance (20085048), 23.6.2009, 18 x 8 ur,
- 11)** ELETTRA (ALOISA), Comparison of Pyridine and Amine Binding to Au Surfaces (20090091), 28.7.2009, 18 x 8 ur,
- 12)** ESRF (ID21), Twoelectron-onephoton xray transitions in Al and Si following double Kshell photoionization (HE3194), 20.10.2009, 12 x 8 ur,
- 13)** ESRF (ID26), RIXS and XES studies of isolated atoms, molecules, and novel (nano)materials in the intermediate xray energy range (HE3098),28.9.2009, 18 x 8 ur,
- 14)** ELETTRA (GasPhase Photoemission), Helium metastable quenching (20090382), 14.9.2009, 21 x 8 ur.
- 15)** ELETTRA (XAFS, In-house), "Degradation and stabilisation of manuscripts containing copper pigments and iron inks, 1. 2. do 5. 2. 2010.
- 16)** HASYLAB, DESY v Hamburgu (A1 in C), II20080058EC "XAS analysis of transition metals in lead-free piezoelectric thin films and in catalysts based on porous silicates", 18. - 25. 5. 2010.
- 17)** SOLEIL (TempoB) 20090159, "Multidimensional photoelectron spectroscopy with Hermes", 24. - 28.2. 2010.
- 18)** ESRF (ID26), EC652, "Xray emission spectroscopy (XES) on sulfur in silicates", 5.- 8. 3. 2010.
- 19)** ESRF (ID26), HE3362, "Molecular Field Effect probed by RIXS on SOCl, CS2 and OCS Molecules, 10.-16. 3. 2010.
- 20)** ELETTRA (GasPhase), 20100240, "Entanglement of Ar LMM Auger decay paths by energy selective photoionization", 22.-29.8. 2010.
- 21)** SOLEIL (Pleiades), "Chemical shift of the C 1s core double ionisation & study of Mercury salts", 12.18.10.2010.
- 22)** HASYLAB, DESY (A1 in C), II20080058 EC "XAS analysis of transition metals in lead-free piezoelectric thin films and in catalysts based on porous silicates", 3. -11.10. 2010
- 23)** ELETTRA (Gaphase), 20100346 "Two-color experiment on He", 8. -15.11. 2010.
- 24)** ELETTRA (Aloisa), 20095442, 31. 5.- 6.6. 2010.
- 25)** ELETTRA (Aloisa), 20100376, 4.-6. 7. 2010.
- 26)** ELETTRA (Aloisa), 2010227, 30. 8. - 4. 9. 2010.
- 27)** ELETTRA 20110230: "High resolution spectroscopy in DC electric field based on two-color production of metastable He".
- 28)** ELETTRA 20105435: "Interference of photoelectron-Auger electron pairs by energy selective photoionization of Ar L shell".
- 29)** ELETTRA 20110412: "Synthesis and electronic structure of ceriumporphyrinato sandwich on Ag(111)".
- 30)** ELETTRA 20105420: "Exciton dissociation at the interface between C60/C70 and highly contorted hexabenzocoronene derivatives for solar cell applications".
- 31)** ELETTRA 20105033: "Understanding The Structure and Charge Transfer Dynamics in Double-Layered Molecules".
- 32)** ELETTRA 20100376: "In situ molecular anchoring: benzoic acid on cysteamine".

- 33)** ELETTRA 20105198: "Resonant Auger emission spectroscopy on transition metal phthalocyanine molecules".
- 34)** ELETTRA 20110225: "Density of unoccupied states and local structure of graphenelike silicon bidimensional layer".
- 35)** ELETTRA 20110043: "Localization of elements, structural and functional organic compounds, and speciation of Cu in sunflower roots treated with CuO nanoparticles".
- 36)** ELETTRA 20110045: "Localization of elements, structural and functional organic compounds, and speciation of Cu in sunflower roots treated with CuO nanoparticles".
- 37)** ELETTRA 20110040: "Localization of sodium in leaves of salt-resistant and salt-sensitive tomato plants exposed to salinity".
- 38)** ELETTRA 20105073: "In-situ XAS studies of positive electrode materials for Li-ion and Na-ion batteries".
- 39)** ELETTRA 20110086: "The role of organic and inorganic sulphur containing compounds in Cd accumulation and tolerance in a Cd hyperaccumulator *Thlaspi praecox*".
- 40)** ELETTRA 20110127: "In situ XAS studies on Li-ion and Li-sulfur batteries".
- 41)** HASYLAB, DESY I20110082EC: "Insitu XAS analysis of electrode materials for Li-ion and Na-ion rechargeable batteries and catalysts based on porous silicates".
- 42)** HASYLAB, DESY II20080058 EC: "XAS analysis of transition metals in lead-free piezoelectric thin films and in catalysts based on porous silicates".
- 43)** ESRF EC719: "Subcellular localization of Cd in plant tissues".
- 44)** ESRF HE3229: "Structural and dynamical properties of chlorinated hydrocarbons in gaseous state studied by high resolution RIXS Cl1s".
- 45)** ESRF EC739: "Chlorine XAS and XES in glasses for radioactive waste immobilization a study of its structural role".
- 46)** SOLEIL: MULTIDIMENSIONAL PHOTOELECTRON SPECTROSCOPY WITH HERMES EXPERIMENT AT PLEIADES BEAMLINE III: "Detailed studies of chemical shift of the Carbon K2 double core ionisation and study of multiple ionization of alkali (and metal) vapours".
- 47)** ELETTRA 20120091: "Intra- and Inter-channel exchange interference in ( $\gamma$ ,2e) angular distribution mediated by Ar2p, Kr3d and Xe4d hole."
- 48)** ELETTRA 20115273: "Understanding Gold-Carbon Covalent Bonds Created Using Trimethyltin Terminated Molecules."
- 49)** ELETTRA 20120173: "Local coordination of Si atoms in graphenelike two-dimensional silicon sheets."
- 50)** ELETTRA 20120267: "Interplay between the TiO<sub>2</sub>(110) Defect States and overlayers of perylenederivative acceptors."
- 51)** ELETTRA 20115112: "Speciation and ligand environment of mercury in roots of mycorrhizal and nonmycorrhizal plants."
- 52)** ELETTRA 20120044: "In situ XAS studies on Li-sulfur batteries."
- 53)** PETRA 20110509: "In-situ NRS mapping of iron based composite electrode materials for Li-ion batteries."
- 54)** HASYLAB DESY 20110082: "In-situ XAS analysis of electrode materials for Li-ion and Na-ion rechargeable batteries and catalysts based on porous silicates."
- 55)** HASYLAB DESY 20110511: "Studies of thiol mediated cadmium and mercury uptake in plants for enhancing phytoextraction efficiency."
- 56)** MAXLAB2, 20120085: "The study of Electronic structure and decay dynamics of hydrochlorocarbons by valence and Cl L-shell Photoexcitation and Ionization."
- 57)** SOLEIL 20110875: "Multidimensional photoelectron spectroscopy with Hermes experiment: Studies of 2-site core double ionization in benzene, C<sub>2</sub>H<sub>n</sub> and C<sub>3</sub>H<sub>n</sub> compounds. "
- 58)** ESRF EC968: "Depicting the role of externaly supplied organic sulphur compounds in Cd uptake, translocation, accumulation and detoxification in Cd hyperaccumulating and nonaccumulating plants. "
- 59)** SLS 20110240: "Electronic structure of nanomagnets studied with 1s RIXS."
- 60)** SSRL 3669A: "Studying atomic multielectronic processes through x-ray emission and resonant inelastic xray scattering."
- 61)** ELETTRA 20130548: "Quantifying charge transport at molecular interface".
- 62)** ELETTRA 20125039: "Probing Quantum Interference in Charge Transfer Processes".
- 63)** ELETTRA 20120267: "Interplay between the TiO<sub>2</sub>(110) Defect State and overlayers of perylenederivative acceptors".
- 64)** ELETTRA 20120173: "Local coordination of Si atoms in graphenelike two-dimensional silicon sheets".
- 65)** ELETTRA 20130168: "Contact doping and semiconductor templating on graphene electrodes for organic photovoltaic devices".
- 66)** ELETTRA 20130544: "Exfoliated graphene: correlation between morphology and electronic properties".



- 67)** ESRF proj. ID: LS2225: "Studies of localization and speciation of iron in vegetative and seed tissues of rice and wheat to enhance biofortification and improve crop yields", 28.2.- 5.3. 2013.
- 68)** ESRF proj. ID: LS 2209 "Studies of thiol mediated cadmium and mercury uptake in plants for enhancing phytoextraction efficiency", 18.6.-24.6. 2013
- 69)** ESRF EV25:"Understanding Cr(VI) reduction and Cr transport in sunflower plants", 16.-23. 7. 2013.
- 70)** ESRF proj. ID: LS/2270: "Investigation of chemical form of iron in grain tissues of diverse wheat genotypes", 9.-12. 11. 2013.
- 71)** ELETTRA proj. ID: 20120044: "In situ XAS studies on Li-sulfur batteries", 29.5.-3.6. 2013
- 72)** ELETTRA proj. ID: 20120044: "In situ XAS studies on Lisulfur batteries", 2.12.- 6.12. 2013
- 73)** APS proj ID: 28934: "Mössbauer Microscopic Investigation of Charge-Discharge Kinetics of Li Batteries".
- 74)** PETRA I2013024EC, "In-situ NRS mapping of LiFePO<sub>4</sub> electrode material for Li-ion batteries"
- 75)** ELETTRA 20130104: "He atom in electric and magnetic field high resolution study of avoided crossings by means of the metastable atom detection".
- 76)** FERMI 20124009, "Multiphoton excitation of He doubly excited states".
- 77)** ESRF CH3910, "In situ time resolved study of the electronic properties of highly luminescent Ag cationic clusters in LTA and FAU zeolites performed with off-resonant RIXS spectroscopy".
- 78)** ESRF CH3914, "Xray absorption and inelastic scattering from sulfuric acid water solutions".
- 79)** SOLEIL 20130309, "Study of ultrafast relaxation processes in core-excited Cl 1s-sigma\* CH<sub>3</sub>Cl."
- 80)** SOLEIL 20130180, "MULTIDIMENSIONAL PHOTOELECTRON SPECTROSCOPY WITH HERMES EXPERIMENT: Studies of Core Double Photoionization".
- 81)** MAXLAB2, 20130044: "PEPIPICO study of CH<sub>3</sub>Cl and CCl<sub>4</sub> @ Cl L edge"
- 82)** SOLEIL 2014: "MULTIDIMENSIONAL PHOTOELECTRON SPECTROSCOPY WITH HERMES EXPERIMENT: Studies of Core Double Photoionization".
- 82)** ELETTRA 20140322: "Optimization of in-line VUV spectroscopy for studies of stimulated emission"
- 83)** ELETTRA 20140133: "Stark mixing of He doubly excited states studied by energy dispersed VUV fluorescence and metastable atom detection".
- 84)** ESRF LS-2275: "Studies of cadmium and mercury ligand environment in fungal endophytes to improve the outcomes of phytostabilisation of extremely metal contaminated sites".
- 85)** ELETTRA 20142014: "Water sorption within the Al/Fe mixed-metal metal-organic framework MIL-100".
- 86)** ELETTRA 20140312: "XAS study of crystallization processes of Cu and Ti containing MOF systems".
- 87)** ELETTRA 20120044: "In situ XAS studies on Li-sulfur batteries".

Spodaj je naštetih 23 IZVEDENIH TNA (Trans National Access) projekti, na osnovi katerih so v obdobju 2009-april 2014 tuji raziskovalci izvajali **meritve z ionskimi žarki** v Mikroanalitskem centru IJS v okviru EU povezave SPIRIT.

- 1)** MIC (Ion microbeam), Prof. Charlotte Poschenrieder, Bioscience Faculty, Autonomous University of Barcelona, PIXE localization of aluminium in tea, maj 2009, 40 ur,
- 2)** MIC (Ion microbeam), Prof. Nathalie Verbruggen, Department de Biologie Vegetale, Universite Libre de Bruxelles, MicroPIXE Analysis of *Haumaniastrum katangense* and *Nicotiana plumbaginifolia*, 27. – 29. 07.2009, 30 ur,
- 3)** MIC (Ion microbeam), Prof. Flavia Navari Izzo, University of Pisa, Italy, MicroPIXE Analysis of *Brassica carinata*, 27. – 29. 07.2009,
- 4)** MIC (Ion microbeam), Prof. Peter Schröder, HelmholtzZentrum München, Abteilung Mikrobepflanzen Interaktionen Localization and quantification of cadmium and lead in *Typha latifolia* plants. Effects of individual and mixed pollution, 10. – 14. 08.2009.
- 5)** "MicroPixe Analysis of an 'Halotropic' Plant. Elemental Distribution in Root and Shoot of *Bassia Indica* under Saline Gradient in Soil", UNI Negev, Israel, MicroPIXE, dr. Avi Golan (Goldhirsh), 21.–25. 2. 2010.
- 6)** "Variability of elements in Scots pine (*Pinus sylvestris* L.) bark and needles in the vicinity of oil refinery in Lithuania", UNI Vilnius, Lithuania, MicroPIXE, dr. Pranas Baltrenas, 13.-17. 4. 2010.
- 7)** "Microlocalization of elements in nonhyperaccumulators plants under different nutrient deficiencies and nutrient and pollutant toxicities", RES Zaragoza, Spain, MicroPIXE, dr. Javier Abadia, 1.-15. 8. 2010.

- 8)** "Chemical speciation of phosphorus compounds by means of high-energy resolution PIXE measurements employing wavelength-dispersive x-ray spectroscopy", RES Grenoble, Cedex, France, High-resolution PIXE spectroscopy, dr. Marine Cotte, 6.-10.9. 2010.
- 9)** "Elemental record of recent laminated tufa sediments as a high-resolution environmental proxy", UNI Madrid, Spain, PIXE, dr. Concepción Fidalgo Hijano, 24.6.-2.7. 2010.
- 10)** "Characterization of zoned patterns by trace elements mapping in diagenetically transformed aragonite to calcite stalagmites", UNI Alcalá de Henares, Spain, PIXE, dr. Ian Fairchild, 21.-23.6. 2010.
- 11)** "Chemical speciation of 3d transition metal compounds by means of high-energy resolution PIXE measurements employing wavelength dispersive x-ray spectroscopy (XES)", RES Zagreb, Croatia, High-resolution PIXE spectroscopy, dr. Milko Jakšić, 13.-17. 9. 2010.
- 12)** "Histological localization of essential and nonessential elements in leaves of *Zygophyllum fabago* exposed to Cd and Zn treatments", UNI Louvain la Neuve, Belgium, MicroPIXE, dr. Stanley Luttz, 23.11.- 8.12. 2010.
- 13)** "Proton Beam Analysis of Late Bronze Age metals from Southern Hungary Source Area and Technology", UNI Szeged, Hungary, In-air PIXE, dr. Gábor Santa, 3.-7.11. 2010.
- 14)** "Quantitative analysis of intracellular gold nanoparticles by proton microscopy", Faculty of Biology, University of Belgrade, Serbia, Institute for Medical Research, Military Medical Academy, Belgrade, Tomić Sergej, Micro-PIXE 13.2.2012-17.2.2012.
- 15)** "Ion beam analysis of Al/Ti and Ni/Ti thin film structures after laser treatments", Institute of nuclear sciences "Vinča", Belgrade, RBS-ERDA, dr. Peruško Davor, 28.03. - 01.04.2011.
- 16)** "The localisation of callose, aluminium and silicon in tissues of Land Cress grown in silicic acid solution and in the presence and absence of aluminium", The Birchall Centre Lennard-Jones Laboratories Keele University Staffordshire, dr. Morgan Nicholas, 16.07. - 22.07.2012.
- 17)** "Modification of the original chemical composition of speleothems during the diagenesis of aragonite to calcite", University of Alcalá de Henares, PIXE, dr. Domingue David, 18.06. - 25.06.2011.
- 18)** "Study of urban aerosol composition by high-resolution PIXE", Institute of Nuclear Research of the Hungarian Academy of Sciences, HR-PIXE, dr. Kertesz Zsafia, 25.09.2011-01.10.2011.
- 19)** "Study of low and high energy satellites of Si", Instituto Tecnológico e Nuclear, Unidade de Física e Aceleradores, dr. Chavez Paola, HR-PIXE, 18.09.2011-24.09.2011.
- 20)** "Localization of sodium in leaves of salt-resistant and salt-sensitive tomato plants exposed to salinity", Université catholique de Louvain, Earth and Life Institute, dr. Lefevre Isabelle, Micro-PIXE 11.12.2012-16.12.2012.
- 21)** "Micro-PIXE Analysis of an 'Halotropic' Plant. Elemental Distribution in Root and Shoot of *Bassia Indica* under Saline Gradient in Soil", Ben-Gurion University of the Negev, dr. Oren Shelef, Micro-PIXE, 11.9.2012-22.9.2012.
- 22)** "Cereal Fe biofortification mediated by external S supply : the durum wheat seed experience, Department of Agriculture and Environmental Sciences (DISA), University of Udine, dr. Magali Schnell Ramos, Micro-PIXE, 22.1.2013-22.1.2013.
- 23)** "Zinc and iron homeostasis in *Arabidopsis thaliana*: novel molecular factors and their influence on metal distribution and concentration", Lehrstuhl für Pflanzenphysiologie, Ruhr-Universität Bochum GERMANY, dr. Camille Larue, Micro-PIXE, 8.7.2013-12.7.2013.