

Oznaka poročila: ARRS-RPROJ-ZP-2011-1/105

**ZAKLJUČNO POROČILO
O REZULTATIH RAZISKOVALNEGA PROJEKTA**

A. PODATKI O RAZISKOVALNEM PROJEKTU

1. Osnovni podatki o raziskovalnem projektu

Šifra projekta	J2-9569	
Naslov projekta	Novi, okolju prijazni, visokoenergijski materiali za litijeve ionske akumulatorje	
Vodja projekta	19277 Robert Dominko	
Tip projekta	J Temeljni projekt	
Obseg raziskovalnih ur	2.838	
Cenovni razred	D	
Trajanje projekta	07.2007 - 06.2010	
Nosilna raziskovalna organizacija	104	Kemijski inštitut
Raziskovalne organizacije - soizvajalke	106	Institut "Jožef Stefan"
Družbeno-ekonomski cilj	13.	Splošni napredek znanja - RiR financiran iz drugih virov (ne iz splošnih univerzitetnih fondov - SUF)

1.1. Družbeno-ekonomski cilj¹

Šifra	05.
Naziv	Energija

2. Sofinancerji²

1.	Naziv	
	Naslov	
2.	Naziv	
	Naslov	
3.	Naziv	
	Naslov	

B. REZULTATI IN DOSEŽKI RAZISKOVALNEGA PROJEKTA

3. Poročilo o realizaciji programa raziskovalnega projekta³

Na začetku projekta smo uporabili različne sintezne metode po katerih smo pripravili Li_2MSiO_4 ($\text{M} = \text{Mn}$ in/ali Fe) vzorce. Sinteza po modificiranem Pechini sol-gel postopku in hidrotermalna sinteza sta omogočili pripravo vzorcev brez nečistoč, medtem ko sinteza po poliolnem postopku ni rezultirala enofaznega vzorca. Velikost delcev je pri vseh sinteznih metodah bila pod 50 nm, kar v principu zadostuje za počasno elektrokemijsko kinetiko dolavanja spojin na osnovi Li_2MSiO_4 ($\text{M} = \text{Mn}$ in/ali Fe) v litijevih ionskih amkumulatorjih. Vzorec pripravljen po hidrotermalni sintezi je bilo potrebno naknadno še prekriti s prevodno ogljikovo fazo, za izboljšano ožičenje aktivnih delcev. Ta dodatna stopnja pri sintezi nam je tudi omogočila selektivno variiranje količine ogljika, ter tudi pripravo aktivnega materiala pri različnih temepraturah, kar se je kasneje izkazalo kot ključno pri izolaciji čistih polimorfnih struktur. Začetne strukturne karakterizacije so pokazala, da Li_2MSiO_4 spojine kristalizirajo v več možnih polimorfnih kristalnih mrežah, ki se med seboj razlikujejo le po obrnjenosti tetraedrov in njihovi medsebojni povezavi. Takšne majhne spremembe v strukturi so najbolje vidne iz NMR spektrov, kjer pride do delnega premika »sideband«. Iz NMR spektrov se vidi, da so večinoma vzorci mešanice večih polimorfov, kar izredno otežuje uporabo rentgenskih praškovnih difraktogramov in analizo po Rietveldu. S pomočjo NMR in Mössbauerske spektroskopije je mogoče določiti polimorfe prisotne v vzorcu in jih nato bodisi selektivno vključiti v Rietveld analizo ali pa uporabiti te podatke za iskanje novih parametrov pri kalcinaciji. Okvirne temperaturne prehode med posameznimi polimorfi smo določili s pomočjo diferencialne kalorimetrije in na osnovi preliminarnih sintez smo določili pogoje po katerih je mogoče izolirati kristalografsko čiste polimorfe različnih spojin na osnovi Li_2MSiO_4 . Tako smo za oba predstavnika družine materialov Li_2MSiO_4 , kjer je $\text{M} = \text{Fe}$ in Mn , ter njuni mešanici, določili temepraturna območja in izoloirali po tri kristalografskočiste polimorfe. NMR karakterizacija vsakega od pripravljenih polimorfov je pokazala natančno število kristalografskih mest litija in s pomočjo teoretičnih izračunov na osnovi DFT kalkulacij smo potrdili ta kristalografska mesta. Na splošno lahko razdelimo polimorfe na nizko temperaturne, kjer so vsi tetraedri obrnjeni v isto smer in se med seboj povezujejo preko ogljišč ter na visokotemepraturne, kjer so tetraedri alternirajoče obrnjeni v določenih sekvenkah in se med seboj povezujejo preko ogljišč ali robov. V tem delu so bile določene nove kristalografske strukture, za kar je doktorandka z deljenim mentorstvom dobila prestižno nagrado kristalografskega združenja ICCD za talentirane mlade kristalografe. Vse strukturno delo je temeljilo na kombinaciji uporabe različnih metod, praškovne rentgenske analize, neutronske difrakcije (dostop je bil preko klegov na Škotskem), elektronske difrakcije, NMR spektroskopije in Mössbauerske spektroskopije. Za zadnjo je potrebno omeniti, da je ključna metoda pri pripravi železovih analogov Li_2MSiO_4 spojin. Mössbauerska spektroskopija se je izkazala za izredno učinkovito metodo, saj omogoča poleg določitve lokalne okolice železa tudi njegovo oksidacijsko stanje. Železo je običajno divalentno v pripravljenih materialih, vendar zaradi občutljivosti železovih spojin na zrak, kar hitro prehaja v trivalentno, kar sprva ne vpliva na strukturo, vendar kasneje vpliva na elektrokemijske lastnosti. Vzorce pri različnih temperaturah smo lahko pripravili iz izhodiščenga materiala, dobljenega po hidrotermalni poti in tudi ta sintezna metoda se je izkazala kot zelo primerna in ponovljiva za pripravo materialov za elektrokemijsko karakterizacijo, ker omogoča pripravo kristalografsko čistih spojin in s tem tudi dobro izhodišče za razumevanje kristalografske raznovrstnosti (polimorfizma) Li_2MSiO_4 materialov ($\text{M} = \text{Fe}$, Mn , Co) in vpliv različnih struktur na elektrokemijske lastnosti. S kombinirano uporabo rentgenske praškovne difrakcije, neutronske difrakcije, NMR spektroskopije in Mössbauerske spektroskopije smo predstavili v različnih publikacijah set karakterizacijskih komplimentarnih metod. Predvsem uporaba zadnjih dveh, ki določa lokalne okolice litija in prehodnih kovin omogoča natančno določitev čistosti polimorfov, kakor tudi njihove prostorske skupine (na osnovi podatkov dobljenih iz XRD in Neutronske difrakcije).

Že na začetki projekta so preliminarne meritve potrjevale, da je elektrokemijsko delovanje $\text{Li}_2\text{FeSiO}_4$ popolnoma reverzibilno, kar smo tudi potrdili z in-situ XRD karakterizacijo, kakor tudi z in-situ uporabo rentgenske absorpcijske spektroskopije in uporabo Mössbauerske spektroskopije. Elektrokemijsko delovanje $\text{Li}_2\text{MnSiO}_4$ ni reverzibilno, kar smo potrdili tudi z in-situ XRD karakterizacijo (med prvo oksidacijo se spojina amorfizira in kristaliničnost se ne povrne) ter in-situ rentgensko absorpcijsko spektroskopijo (ta metoda je potrdila, da do izgube urejenosti v kristalni strukturi pride zaradi neurejenosti okolice manganovega tetraedra, ko le ta skuša preiti v tetravalnetno oksidacijsko stanje). Ta eksperimentalna opažanja so bila potrjena tudi z DFT teoretičnimi izračuni, ki poleg napovedi o stabilnosti $\text{Li}_2\text{FeSiO}_4$ faze ter amorfizaciji $\text{Li}_2\text{MnSiO}_4$ faze, napovejo stabilnost trdnih raztopin $\text{Li}_2\text{Mn}_x\text{Fe}_{(1-x)}\text{SiO}_4$, kjer delež mangana ne presega 75 mol.%. Preliminarne elektrokemijske meritve mešanice $\text{Li}_2\text{Mn}_{0.25}\text{Fe}_{0.75}\text{SiO}_4$ kažejo na možnost reverzibilne elektrokemijske reakcije, kjer bomo lahko reverzibilno izkoriščali spremembo oksidacijskega stanja mangana iz Mn(II) v Mn(IV). Trdne raztopine je mogoče pripraviti po hidrotermalni sintezi. Sintetizirali smo serijo $\text{Li}_2\text{Mn}_x\text{Fe}_{(1-x)}\text{SiO}_4$ vzorcev in stukturna karakterizacija je pokazala, da zaradi različnega ionskega radija Mn in Fe se velikost kristalografske celice linearno spreminja z različno sestavo, ker je potrdilo za uspešno pripravo trdnih raztopin. Nadaljnje potrditev smo dobili še iz Neutronske difracije, ki je potrdila, da je razporaditev Fe in Mn atomov znotraj kristalografske rešetke skoraj idealna, kar naj bi po teoriji omogočilo izboljšano kapaciteto Mn dopiranih $\text{Li}_2\text{FeSiO}_4$ spojin. S kombinacijo in-situ XRD meritve in elektrokemijskih meritve smo testirali potencialno okno delovanja $\text{Li}_2\text{Mn}_{0.2}\text{Fe}_{0.8}\text{SiO}_4$ spojine. Elektrokemijske meritve pokažejo padec kapacitete, če omogočimo polnjenje baterije do 4.5 V glede na kovinski litij. Eden izmed možnih razlogov za padec kapacitete je degradacija strukture, kar smo določili iz in-situ XRD meritve, zato je potrebno omejiti delovanje spojin do 4.2 V. Namreč pri tej napetosti nismo zaznali nobene degradacije strukture s pomočjo in-situ XRD meritve. Naslednji pomemben parameter, ki vpliva na delovanje Li_2MSiO_4 spojin je sestava elektrolita. Slednje se je izkazalo kot ključno, ko smo v raziskovalno delo na Mn dopiranih $\text{Li}_2\text{FeSiO}_4$ materialih še vključili in-situ Mössbauersko spektroskopijo ter rentgensko absorpcijsko spektroskopijo. Metodi, ki sta občutljivi na spremembo oksidacijskega stanja prehodnih kovin in na spremembe njihove lokalne okolice, sta pokazali, da kljub temu da dosegamo visoke kapacitete (tako kot smo predvideli v začetku projekta), le-te niso povezane samo s spremembami oksidacijskega stanja prehodne kovine, temveč tudi najverjetneje z delno degradacijo elektrolita po površini delcev (kapacitete so delno tudi odvisne od količine in vrste elektrolita, ki smo ga uporabili pri naših eksperimentih). So pa te meritve potrdile hipotezo, da lahko železo stabilizira delovanje mangana v LiMSiO_4 spojinah, če je le delež mangana majhen. V zadnjem delu trajanja projekta smo uporabili tudi nekatere ionske tekočine, kar bi omogočilo pripravo se bolj varnega Li-ionskega akumulatorja kot potencialne elektrolite in te raziskave so še v teku.

V celotnem obdobju trajanja projekta je obstajalo tudi vprašanje, kako različne kristalografske strukture vplivajo na elektrokemijski potencial. Zaradi stabilnost materialov je takšno delo najboljše izvedljivo z uporabo $\text{Li}_2\text{FeSiO}_4$ spojin. Z načrtovano pripravo vzorcev, ki so tudi elektrokemijsko aktivni in s skrbno izbranimi meritvami smo se približali termodinamskim ravnotežjem za vsak polimorf posebej. Pokazali smo, da obstaja merljiva razlika med polimorfi in to je mogoče korelirati s povprečno dolžino vezi železo-kisik. Namreč krajše razdalje med železom in kisikom, ki so potrebne če se tetraedri v strukturi povezujejo med seboj preko robov, pomenijo tudi bolj kovalenten značaj vezi (bolj močne), kar posledično pomeni manjšo razliko med elektrokemijskimi potenciali litija in Fe(II)/Fe(III) redoks para in ravno obratno daljša vez, ki je v strukturah, kjer se tetraedri povezujejo med seboj z ogljišči, ima bolj ionski značaj. To delo je prvo takšne vrste v spojina za litijeve ionske akumulatorje, kjer smo v spjini z enako kemijsko sestavo, le z različno razporeditvijo, nedvoumno izmerili različne elektrokemijske potenciale.

4. Ocena stopnje realizacije zastavljenih raziskovalnih ciljev⁴

Vsi načrtovani projektni cilji so bili doseženi in so tudi opisani v člankih, kateri so že objavljeni. Kot najbolj ustrezena sintezna pot se je izkazala hidrotermalna sinteza, ki omogoča pripravo majhnih delcev (tipično okoli 30-50 nm) in tudi je dober startni material za pripravo razičnih polimorfov, kakor tudi za pripravo materiala za elektrokemijsko karakterizacijo (dobro ozičenih delcev). Uspeli smo izolirati novo kristalno strukturo in pokazali smo vpliv polimorfizma na elektrokemijsko obnašanje Li₂FeSiO₄ (korelacija med dolžino vezi – njenim kovalentnim značajem in elektrokemijskim potencialom). Hidrotermalna sintezna metoda je omogočila pripravo homogenih mešanic med Fe in Mn v Li₂MSiO₄, kar je bilo tudi potrjeno z Neutronsko difrakcijo. Osnovna karakterizacija Li₂Mn0.2Fe0.8SiO₄ je pokazala, da je kristalna struktura enaka kot pri čistem železovem analogu in da ima vzorec veliko elektrokemijsko aktivnost, ki presega 1 mol litija na mol spojine. Bolj natačna karakterizacija z uporabo in-situ metod (Mössbauerske spektroskopije in rentgenske absorpcijske spektroskopije) pa je ovrgla možnost prehoda Mn(II) v Mn(IV) in del kapacitete smo pripisali degradacijskim procesom elektrolita, ki pa so vsaj delno redoks reverzibilni procesi. Kot pravilna pa se je izkazala napoved iz računalniških simulacij, kjer smo napovedali, da je pri nizkem deležu Mn v Li₂MSiO₄ strukturi, le-tega mogoče izkoriščati brez irrversibilne spremembe v strukturi. Slednje je bilo potrjeno z rentgensko absorpcijsko spektroskopijo. V celotnem trajanju projekta nismo dosegli Mn(IV) oksidacijskega stanja z elektrokemiso oksidacijo, kar pripisujemo dejству, da tetravalenten mangan ne obstaja v tetraedrični koordinaciji (ponavadi se pojavlja v oktaedrični koordinaciji). Pri delu so bile poleg predvidenih karakterizacijskih tehnik uporabljene tudi nekatere druge tehnike (kot npr. Nutronska difrakcija, rentgenska absorpcijska spektroskopije, ...) kar nam je omogočilo kritičen in natančen vpogled v dogajanje pred in med elektrokemijskim delovanjem preučevanih materialov. Potrdili smo hipotezo, da je NMR tehnika precej bolj občutljiva na različne kristalografske strukture v katerih se nahajajo polimorfi. Ta hipoteza je potrjena s teoretičnimi izračuni in bo v prihodnje pomagala pri natančni karakterizaciji vzorcev.

5. Utemeljitev morebitnih sprememb programa raziskovalnega projekta oziroma sprememb, povečanja ali zmanjšanja sestave projektne skupine⁵

Med izvajanjem projekta smo sledili zastavljenim ciljem ob prijavi projekta in ni prišlo do nobenega odstopanja v celotnem obdobju trajanja projekta.

6. Najpomembnejši znanstveni rezultati projektne skupine⁶

Znanstveni rezultat			
1.	Naslov	SLO	Vpliv strukture na elektrokemijo Li ₂ FeSiO ₄
		ANG	Dependence of Li ₂ FeSiO ₄ electrochemistry on structure
	Opis	SLO	V tem delu smo pripravili tri kristalografsko čiste polimorfe Li ₂ FeSiO ₄ , ki se razlikujejo med seboj v orientaciji FeO ₄ tetraedrov, njihovi distorcijski in dolžini Fe-O vezi. Te majne ampak merljive razlike vplivajo na elektrokemijski potencial med prvo oksidacijo Fe ²⁺ v Fe ³⁺ v vseh polimorfih Li ₂ FeSiO ₄ . Začetna struktura ima tudi vpliv na kinetiko termodinamske stabilizacije, ki se zgodi v začetnih ciklih. Opisan sistem je enkraten, ki pokaže, da znotraj

		iste sestave lahko različne dolžine vezi (njihova kovalentnost) vplivajo na elektrokemijski potencial.
	ANG	In our work we succeeded to isolate three pure polymorphs of Li ₂ FeSiO ₄ , which differ between them self in the FeO ₄ arrangements (orientation, Fe-O bond lenght, and distortion). These small differences do influence on the equilibrium potential measured during the first oxidation of Fe ²⁺ into Fe ³⁺ in all polymorphs of Li ₂ FeSiO ₄ . Starting structure has an influence on the kinetics of the thermodynamic stabilization. This is unique system which within the same composition shows the influence of the bond covalence on the electrochemical potential.
Objavljeno v		SIRISOPANAPORN, Chutchamon, MASQUELIER, Christian, BRUCE, Peter G., ARMSTRONG, A. Robert, DOMINKO, Robert. Dependence of Li ₂ FeSiO ₄ electrochemistry on structure. J. Am. Chem. Soc., 2011, vol. 133, no. 5, str. 1263-1265, JRC IF(2009) 8.58
Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek
COBISS.SI-ID		4600090
2.	Naslov	<p><i>SLO</i> 6Li MAS NMR spektroskopija in teoretične kalkulacije kot</p> <p><i>ANG</i> 6Li MAS NMR spectroscopy and first-principles calculations as a combined tool for the investigation of Li₂MnSiO₄ polymorphs</p>
	Opis	<p><i>SLO</i> Z jedrsko magnetno resonanco, natančneje s spektroskopijo jeder 6Li, smo študirali polimorfizem Li₂MnSiO₄. Izotropni premike in širine spektralnih črt, ki smo jih izmerili, smo primerjali z zelo natančnimi napovedmi ab-initio izračunov. Ta primerjava nam je omogočila dodatno razumevanje strukturnih razlik med polimorfi. Računski pristop, ki smo ga uporabili za napovedovanje izotropnih kemijskih premikov, smo uspešno preverili tudi na več paramagnetičnih litijevih spojinah.</p> <p><i>ANG</i> Polymorphism of Li₂MnSiO₄ was inspected by 6Li MAS NMR spectroscopy. The detected isotropic shifts and spinning-sideband patterns were successfully reproduced by first-principles calculations and offered an insight into structural differences among the polymorphs. The approach for predicting isotropic shifts was also tested on several other Li-containing paramagnetic structures.</p>
	Objavljeno v	MALI, Gregor, MEDEN, Anton, DOMINKO, Robert. 6Li MAS NMR spectroscopy and first-principles calculations as a combined tool for the investigation of Li ₂ MnSiO ₄ polymorphs. Chem. commun. (Lond., 1996), 2010, issue 19, str.3306-8, JRC IF(2009) 5.504
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek
	COBISS.SI-ID	4386074
3.	Naslov	<p><i>SLO</i> Nov Li₂FeSiO₄ polimorf in njegova kristalna struktura</p> <p><i>ANG</i> Crystal structure of a new polymorph of Li₂FeSiO₄.</p>
	Opis	<p><i>SLO</i> V tem delu smo objavili kristalno strukturo novega Li₂FeSiO₄ polimorfa, ki je bil pripravljen z hitrim ohlajanjem iz 900°C na 25°C v argonovi atmosferi. Strukturo smo določili s kombinacijo elektronske mikroskopije, Neutronske difrakcije in rentgenske praškovne analize. Novo strukturo Li₂FeSiO₄ lahko opisemo s prostorsko skupino Pmnb (a = 6.2836(1) Å, b = 10.6572(1) Å, c = 5.0386(1) Å.). Struktura se razlikuje od že znanih struktur (ki so bile izolirane pri nižjih temperaturah) po orientaciji in sekvenci FeO₄ in SiO₄ tetraedrov.</p> <p><i>ANG</i> This work reports the crystal structure of a new polymorph of Li₂FeSiO₄ (prepared by annealing under argon at 900°C and quenching to 25°C). Structure was determined by electron microscopy and X-ray and neutron powder diffraction. The crystal structure of Li₂FeSiO₄ quenched from 900°C is described in the space group Pmnb with lattice parameters a = 6.2836(1) Å, b = 10.6572(1) Å, c = 5.0386(1) Å. It differs from previously published structures obtained at lower temperatures on the respective orientations and alternate sequences of corner-sharing FeO₄ and SiO₄ tetrahedra.</p>
	Objavljeno v	SIRISOPANAPORN, Chutchamon, BOULINEAU, Adrien, HANŽEL, Darko, DOMINKO, Robert, BUDIČ, Bojan, ARMSTRONG, A. Robert, BRUCE, Peter G., MASQUELIER, Christian. Crystal structure of a new polymorph of Li ₂ FeSiO ₄ . Inorg. chem., 2010, vol. 49, str. 7446-7451, JRC IF(2009) 4,657
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek
		4468250

COBISS.SI-ID			
4.	Naslov	SLO	In-situ XAS študija Li ₂ MnSiO ₄ in Li ₂ FeSiO ₄ katodnih materialov
		ANG	In-situ XAS study on Li ₂ MnSiO ₄ and Li ₂ FeSiO ₄ cathode materials
	Opis	SLO	V članku je opisana (in-situ) študija Li ₂ MnSiO ₄ in Li ₂ FeSiO ₄ katodnih materialov. Z rentgensko absorpcijsko spektroskopijo smo spremljali, kako se spreminja lokalna okolica in oksidacijsko stanje železa in mangana sočasno z elektrokemijsko oksidacijo in redukcijo preiskovanih katodnih materialov. Metoda EXAFS nam je omogočila boljše razumevanje razlik v delovanju dveh izostrukturnih materialov, namreč deformacije strukture, ki nastanejo med oksidacijo so popolnoma reverzibilne v primeru Li ₂ FeSiO ₄ in le deloma v primeru Li ₂ MnSiO ₄ .
		ANG	Paper describes the in-situ study of Li ₂ MnSiO ₄ and Li ₂ FeSiO ₄ cathode materials with X-ray absorption spectroscopy. Local environment and oxidation state of Fe and Mn were simultaneously monitored during the electrochemical oxidation and reduction. In this work with the help of EXAFS analysis we discovered that deformations that occur during the reduction process are completely reversible in the case of Li ₂ FeSiO ₄ and only partially in the case of Li ₂ MnSiO ₄ . This work confirmed anomalies observed from in-situ characterisation with X-ray diffraction spectroscopy.
	Objavljeno v	DOMINKO, Robert, ARČON, Iztok, KODRE, Alojz, HANŽEL, Darko, GABERŠČEK, Miran. In-situ XAS study on Li ₂ MnSiO ₄ and Li ₂ FeSiO ₄ cathode materials. J. power sources., 2009, vol. 189, no. 1, str. 51-58 JRC IF(2009) 3,792	
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek	
	COBISS.SI-ID	1073915	
5.	Naslov	SLO	Izvor elektrokemijske kapacitete v Li ₂ Fe0.8Mn0.2SiO ₄
		ANG	On the origin of the electrochemical capacity of Li ₂ Fe0.8Mn0.2SiO ₄
	Opis	SLO	Vzorec Li ₂ Fe0.8Mn0.2SiO ₄ pripravljen po hidrotermalni sintezi smo elektrokemijsko karakterizirali s pomočjo in-situ Mössbauerske spektroskopije in in-situ rentgenske absorpcijske spektroskopije. Čeprav je katodni material visoko elektrokemijsko aktivnost v začetnih ciklih delovanja je le del te aktivnosti mogoče pripisati spremembi oksidacijskih stanj železa in mangana. Skupna sprememba oksidacijskih stanj ni presegal 0.8 elektrona na obe prehodni kovini skupaj. Potrdili smo predpostavko, da je mogoče stabilizirati delovanje mangana v mreži Li ₂ FeSiO ₄ , v primeru ko je delež mangana nizek.
		ANG	The selected Li ₂ Fe0.8Mn0.2SiO ₄ sample prepared by hydrothermal synthesis was electrochemically evaluated by the use of in-situ Mössbauer spectroscopy and in-situ X-ray absorption spectroscopy. Although sample showed high electrochemical activity in the formation cycles, only part of it can be connected with the change of oxidation states. The overall change of oxidation state did not exceed more than 0.8 electron per both transition metals. The prediction that the local environment around Mn in Li ₂ FeSiO ₄ (when the Mn doping is low) can be stabilized during the oxidation has been confirmed.
	Objavljeno v	DOMINKO, Robert, SIRISOPANAPORN, Chutchamon, MASQUELIER, Christian, HANŽEL, Darko, ARČON, Iztok, GABERŠČEK, Miran. On the origin of the electrochemical capacity of Li ₂ Fe0.8Mn0.2SiO ₄ . J. Electrochem. Soc., 2010, vol. 157, no. 12, str. A1309-A1316. JRC IF(2009) 2,241	
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek	
	COBISS.SI-ID	1613051	

7. Najpomembnejši družbeno-ekonomsko relevantni rezultati projektne skupine⁶

	Družbeno-ekonomsko relevantni rezultat		
1.	Naslov	SLO	Silikati in titanati kot visokoenergijski katodni materiali za litijeve ionske akumulatorje
		ANG	Silicates and titanates as high-energy cathode materials for Li-ion batteries
			Na mednarodnem srečanju znanstvenikov in industrije, ki delujejo na področju senzorske tehnologije, je imel vodja projekta vabljeno predavanje

	Opis	<i>SLO</i>	iz področja litijevih ionskih akumulatorjev. Na konferenco so bili povabljeni skrbno izbrani raziskovalci in vsakdo je pokazal napredek na posameznem sklopu litijevega ionskega akumulatorja. Moje predavanje je obsegalo napredek na katodnih materialih in sem predstavil najnovejše dosežke v laboratoriju za elektrokemijo materialov, ki so predvsem v povezavi z tem projektom.
		<i>ANG</i>	Project leader was invited to give a talk on lithium ion batteries at the international meeting on the field of sensor technology. Organizers carefully selected few established scientist to present achievements connected with different topics inside lithium ion battery research. My lecture was based on the new achievements on the filed of high energy density cathode materials which were mainly result of this project.
	Šifra	B.04	Vabljeno predavanje
	Objavljen v		DOMINKO, Robert. Silicates and titanates as high-energy cathode materials for Li-ion batteries. V: DHAR, Nibir K. (ur.). Energy harvesting and storage : materials, devices, and applications : proceedings of SPIE : 5-6 April 2010, Orlando, Florida, United States, (Proceedings of SPIE, vol. 7683). Bellingham: SPIE, 2010, 8 str
	Tipologija	1.06	Objavljeni znanstveni prispevek na konferenci (vabljeno predavanje)
	COBISS.SI-ID	4455194	
2.	Naslov	<i>SLO</i>	Li ₂ MSiO ₄ (M=Fe in/ali Mn) katodni materiali
		<i>ANG</i>	Li ₂ MSiO ₄ (M=Fe and/or Mn) cathode materials
	Opis	<i>SLO</i>	Na mednarodnem znanstvenem srečanju v okviru "International Battery Association" je imel vodja tega projekta vabljeno predavanje, v katerem je pokazal nove raziskovalne dosežke na področju Li ₂ MSiO ₄ spojin. Poudarek je bil predvsem na uporabnosti Li ₂ MSiO ₄ spojin na področju litijevih ionskih akumulatorjev in razumevanju različnih polimorfnih struktur, v katerih Li ₂ MSiO ₄ spojine kristalizirajo. Pomen mednarodne konference izkazuje tudi dejstvo, da je bila posvečena prof. Besenhardu, pionirju na področju litijevih ionskih akumulatorjev, ki je preminul leta 2006.
		<i>ANG</i>	Project leader gave an invited lecture at the international meeting of "International Battery Association". Lecture was based on new achievements in the field of Li ₂ MSiO ₄ materials in scope of their performance in Li-ion batteries and understanding of different crystal structures. The importance of the international meeting can be reflected with a fact that it was dedicated to prof. Besenhard, pioneer on the field of Li-ion batteries, who passed away in 2006.
	Šifra	B.04	Vabljeno predavanje
	Objavljen v		DOMINKO, Robert, GABERŠČEK, Miran, BELE, Marjan, MALI, Gregor, MEDEN, Anton, HANŽEL, Darko, KOKALJ, Anton, JAMNIK, Janko. Li _{[sub]2} MSiO _{[sub]4} (M=Fe and/or Mn) cathode materials : [invited lecture]. V: International Battery Materials Association 2007 conference : Shenzhen, China, November 16-20, 2007. [S.I.]: International Battery Materials Association, 2007, str. 14-15.
	Tipologija	1.06	Objavljeni znanstveni prispevek na konferenci (vabljeno predavanje)
	COBISS.SI-ID	3831834	
3.	Naslov	<i>SLO</i>	2. slovensko - hrvaški simpozij o zeolitih
		<i>ANG</i>	2nd Slovenian-Croatian symposium on zeolites
	Opis	<i>SLO</i>	Kot član organizacijskega odbora sem sodeloval pri organizaciji mednarodne konference '2nd Slovenian-Croatian symposium on zeolites', ki je bila od 1. in 2. oktobra 2009 v Ljubljani. Znanstvene konference v Sloveniji omogočajo izmenjavo znanja med raziskovalci, predvsem pa promovirajo slovensko znanost, slovenske raziskovalne skupine in matične ustanove.
		<i>ANG</i>	As a member of the organizing committee Gregor Mali took part in organisation of the international conference '2nd Slovenian-Croatian symposium on zeolites', which was held on the 1st and 2nd October 2009 in Ljubljana. Scientific meetings in Slovenia are an important opportunity to exchange knowledge among scientists, but even more important opportunity to promote Slovenian science, Slovenian research groups and institutions.
	Šifra	B.01	Organizator znanstvenega srečanja

	Objavljen v	NOVAK TUŠAR, Nataša, KAUČIČ, Venčeslav, ZABUKOVEC LOGAR, Nataša, MALI, Gregor, RISTIĆ, Aleška, MAZAJ, Matjaž, CECOWSKI, Saša, RANGUS, Mojca, UKMAR, Tina, MAUCEC, Darja, KRANJC, Edi, OPRESNIK, Mojca, GORSE, Olga. 2nd Slovenian-Croatian symposium on zeolites : October 1-2, 2009, Ljubljana, Slovenia. 2009.	
	Tipologija	4.00 Sekundarno avtorstvo	
	COBISS.SI-ID	4285722	
4.	Naslov	<i>SLO</i>	Strukturne in elektrokemijske lastnosti Li ₂ MSiO ₄ , (M=Fe and/or Mn)
		<i>ANG</i>	Structural and electrochemical characterisation of Li ₂ MSiO ₄ , (M=Fe and/or Mn)
	Opis	<i>SLO</i>	Virtualni evropski laboratorij na litijevih ionskih akumulatorjih (katerega član je Kemijski inštitut) je član konzorcija v okviru katerega deluje mednarodna »Erasmus Mundus« šola - Materials for Energy Storage and Conversion (II. bolonjska stopnja). V letu 2008 je bil vodja projekta metor študentki iz Španije, Audrey CHAPELLE, ki je uspešno zagovarjala magistersko delo z naslovom "Structural and electrochemical characterisation of Li ₂ MSiO ₄ , (M=Fe and/or Mn)" septembra 2008 v Amiens (Francija). Audrey nadaljuje njen doktorski študij na Univerzi v Toulouse (Francija).
		<i>ANG</i>	National Institute of Chemistry as a member of the virtual European laboratory for lithium ion batteries is a member of consortium which includes international »Erasmus Mundus« school - Materials for Energy Storage and Conversion. Project leader was thesis advisor for the Spanish student Audrey CHAPPELE, who successfully finished her master study with a defence of thesis "Structural and electrochemical characterisation of Li ₂ MSiO ₄ , (M=Fe and/or Mn)" in September 2008 in Amiens (France). She is continuing with her PhD study at the University of Toulouse.
	Šifra	B.04 Vabljeno predavanje	
	Objavljen v	CHAPELLE, Audrey. Structural and electrochemical characterisation of Li ₂ MSiO ₄ , (M=Fe and/or Mn) : [master thesis]. [S.l.: A. Chapelle], 2008. 46 f., ilustr.	
	Tipologija	4.00 Sekundarno avtorstvo	
	COBISS.SI-ID	3987226	
5.	Naslov	<i>SLO</i>	Mednarodna konferenca SLONANO2009
		<i>ANG</i>	International conference SLONANO2009
	Opis	<i>SLO</i>	V oktobru 2009 je na Kemijskem inštitutu potekala osma tradicionalna konferenca kemikov, fizikov in ostalih raziskovalcev na področju nanotehnologij "SLONANO 2009". Namen konference je bil prikazati dosežke slovenskih raziskovalcev na razvijajočih se področjih uporabe nanotehnologij s poudarkom na temah "Nanomateriali za shranjevanje in pretvorbo energije" in "Bionanotehnologija". V okviru konference so bila vabljena predavanja vrhunskih svetovnih strokovnjakov na omenjenih področjih, nakar so sledila predavanja predvsem mlajših raziskovalcev na celotnem področju nanotehnologije.
		<i>ANG</i>	National Institute of Chemistry was a host institution for a traditional meeting SLONANO 2009 in october 2009: This meeting was organised for researchers that are working on the field of chemistry, physics and other fields. This year conference was specially devoted to the field of "Nanomaterials for energy storage and conversion" and to "Bionanotechnology". Organizers of the conference invited several top level world researchers from the devoted fields and this was a motivation for mainly younger colleagues to present their works from different fields of nanotechnology.
	Šifra	B.01 Organizator znanstvenega srečanja	
	Objavljen v	MIHAJOVIĆ, Dragan (ur.), DOMINKO, Robert (ur.), VILFAN, Mojca (ur.). Book of abstracts : SLONANO 2009, 19-21 October 2009, Ljubljana. Ljubljana: National Institute of Chemistry, 2009. 108 str., ilustr	
	Tipologija	4.00 Sekundarno avtorstvo	
	COBISS.SI-ID	23023143	

8. Drugi pomembni rezultati projektno skupine⁸

D.01 Vodenje/koordiniranje (mednarodnih in domačih) projektov
Vodja projekta, ki je obenem tudi vodja skupine laboratorijskih, ki se ukvarjajo s katodnimi materiali za litijeve ionske akumulatorje v sklopu virtualne mreže laboratorijskih ALISTORE-ERI ima letno enkrat predavanje na temo Li₂MSiO₄ katodnih materialov pred predstavniki vseh 24 laboratorijskih in 15 industrijskih partnerjev, ki so vključeni v to mrežo. Obenem na letni ravni organizira dva posvetovalna sestnaka te skupine, kjer so prikazani tudi dosežki drugih skupin na področju, ki ga je pokrival zaključen projekt.

F.1, F.2, F.17, F.34, G.3.1 Vpeljava modernih metod jedrske magnetne rezonance visoke ločljivosti v trdnem v slovenski prostor

V nasprotju z jedrsko magnetno resonanco širokih črt v trdnih snoveh in z jedrsko magnetno resonanco visoke ločljivosti v tekočinah, ki sta v Sloveniji že močno uveljavljeni, je bila visoko-ločljiva magnetna rezonanca v praškastih materialih pri nas doslej skoraj neznana. Vendar pa je ta sklop metod, ki jih bolje poznamo pod skupnim imenom metode MAS NMR in pri katerih visoko ločljivost meritev zagotavljamo s hitrim vrtenjem vzorca pod tako imenovanim magičnim kotom (magic angle spinning - MAS), izjemno pomemben za karakterizacijo vseh vrst materialov. Da so potrebe po teh meritvah tudi v Sloveniji velike, se je jasno pokazalo že po prvih letih, ko smo MAS NMR vpeljali v Nacionalnem centru za NMR spektroskopijo na Kemijskem inštitutu. Jedrska magnetna rezonanca visoke ločljivosti v trdnem je postala nepogrešljiva metoda za študij nanoporoznih materialov, heterogenih katalizatorjev, ki jih pripravljamo v Laboratoriju za anorgansko kemijo in tehnologijo, za raziskave gelov ionskih tekočin, sestavin foto-elektrokemijskih celic, s katerimi se ukvarjajo v Laboratoriju za spektroskopijo materialov, vse več raziskujemo tudi nove litijeve spojine, glavne komponente zmogljivih baterij, ki jih razvijajo v Laboratoriju za elektrokemijo materialov, in študiramo vodikove vezi.

9. Pomen raziskovalnih rezultatov projektne skupine⁹

9.1. Pomen za razvoj znanosti¹⁰

SLO

Projekt je v osnovi tematsko usmerjen temeljni raziskovalni projekt, ki izkorišča znanja s področja Znanosti o materialih in računalniških simulacij ter kombinacijo različnih „in-situ“ karakterizacijskih metod z namenom razumeti delovanje naprednih katodnih materilov z povišano energijsko gostoto. Takšen interdisciplinarni pristop, kjer se sočasno uporablja več karakterizacijskih tehnik, je v primeru litijevih ionskih akumulatorjev še posebej zahteven saj gre za večkomponentne ter večfazne sisteme s številnimi mejnimi področji, ki jih dodatno zapletejo termodinamske in kinetične lastnosti elektrod. „In-situ“ karakterizacijske metode, podprtne z računalniškimi simulacijami, ki jih uporabljamo v projektu, so v uporabi samo v nekaj laboratorijsih po svetu. Obenem pa nam njihova kompleksnost omogoča pridobivati nova znanja o materialih ter vpogled v fizikalno kemijske lastnosti nekaterih materialov med uporabo v realnih sistemih, t.j. v litijevem ionskem akumulatorju. V projektu pridobljeni rezultati s kombinacijo različnih in-situ karakterizacijskih tehnik (in-situ kombinacija XRD in elektrokemije, in-situ kombinacija XRD in sinteze, in-situ kombinacija elektrokemije in Mössbauerske spektroskopije, in-situ kombinacija elektrokemije in rentgenske absorpciovske spektroskopije) dajejo celoten vpogled v delovanje predlaganih katodnih materialov, obenem pa so rezultati teh metod izredno dobro odmevni v znanstvenih krogih na področju, ki ga pokriva projektna skupina. Postavite in uporaba različnih metod (predvsem in-situ) je in bo v prihodnje uporabna tudi v razvoju novih materialov, saj je potreba po shranjevanju električne energije iz dneva v dan vedno večja. Projekt je obenem tudi omogočil nov pristop karakterizacije obravnavanih materialov z nuklearno magnetno resonanco (NMR), ki je edinstven na področju sorodnih polimorfnih spojin in omogoča veliko lažjo strukturno karakterizacijo. Preliminarna dodatna preverjanja z uporabo računalniških simulacij nakazujejo na pravilnost pristopa in bodo bistveno vplivala na razumevanje fizikalno kemijski lastnosti preučevane skupine materilov in tudi širše.

ANG

This is a target oriented basic research project. It combines the basic knowledge from the conventional field of materials science, the ab initio theoretical approach (DFT) and combination of different „in-situ“ characterisation techniques with one goal: to prepare and characterise novel, environmental friendly and high energy density electrode materials for lithium ion batteries. Such an interdisciplinary approach where we are simultaneously using different characterisation techniques is very rare in the battery research – due to extreme complexity of the system (this is multi-component system with several different phases and different

thermodynamic and kinetics problems). The use of combinations of „in-situ“ characterisation techniques supported with computer simulations is very rare in our community. However, their complexity enables us obtaining of new knowledge about materials and very good insight into physical and chemical properties of selected materials in the real systems. Results obtained with the combination of different „in-situ“ characterisation techniques (in-situ combination of XRD and electrochemistry, in-situ combination of XRD and synthesis, in-situ combination of Mössbauer spectroscopy and electrochemistry, in-situ combination of XAS and electrochemistry) give complete picture about the properties of investigated cathode materials and these results are very well accepted in the international community. Such a combined approach in the materials investigation is already in use with other type of materials and it will be in our opinion very useful setup in the future, since the need for energy storage is more and more important. Within the project we established new approach of the materials characterisation with solid state nuclear magnetic resonance (NMR), which is unique in the field of the research of polymorphs, since it enables much easier structural characterisation. Preliminary tests with the use of computer simulations show that approach is correct and it can be used also with other polymorphs that contain paramagnetic centres.

9.2. Pomen za razvoj Slovenije¹¹

SLO

Shranjevanje električne energije iz obnovljivih virov, oz. energije na splošno postaja svetovni problem. V tem pogledu je delo na projektu primarnega inetersa na svetovnem nivoju in uvršča našo projektno in raziskovalno skupino v sam svetovni vrh, kar je tudi promocija Slovenije znotraj raziskovalnega področja in zainteresiranih industrijskih partnerjev širok po svetu. Delo na projektu je privabilo k sodelovanju priznane raziskovalce na našem področju iz različnih univerz in raziskovalnih institucij. Takšna sodelovanja samo plemenitijo rezultate tega projekta. Ta sodelovanja se izražajo v skupnem mentorstvu doktorandke iz Tajske s francosko univerzo Universite de Picardie Jules Verne v Amiens (financirana je iz strani francoskega partnerja oz. pristojne francoske agencije) ter v vodilni vlogi vodje projekta v virtualni mreži evropskih laboratoriјev, ki delujejo na področju raziskav na litijevih ionskih akumulatorjih. Močna vpletjenost v evropski raziskovalni prostor omogoča še bolj kvalitetne raziskave in obenem utrjuje ugled naše raziskovalne skupine na evropskem in tudi svetovnem nivoju. Obenem lahko tudi potrdimo, da pridobljena znanja, če ravno niso direktno uporabna v slovenski industriji, nam omogočajo reševanje težav s katerimi se srečujejo naši industrijski partnerji.

ANG

Energy storage from the renewable sources is a worldwide problem and from this aspect the project is of the primary interest in the world. Work on this project is promoting our project group and research group to the top world class groups, what is at the same time also a promotion for Slovenia as a country on the research field and within the group of potential industrial partners interested into this kind of research. Work on the project has attracted several different world respected researchers who are helping us with specialized knowledge and instrumental methods not available in Slovenia (like Neutron diffraction). Collaboration with foreign institutions is reflected also in shared PhD student between University of Ljubljana and Universite de Picardie Jules Verne v Amiens (financed by French side) who works on the topic of the project. Project leader is at the same time also thesis advisor on the Slovenian side of this collaboration and a coordinator of the one part of the research (dealing with cathode materials) in the virtual network for Li-ion batteries (ALISTORE-ERI) what again confirms his competences and experience in the filed of advanced materials for Li-ion batteries. All strong international relations enable even more qualitative research approach and at the same time make our position much stronger on the worldwide level. At the same time we can say that, although that knowledge is not directly applicable within the Slovenian industry, it can be successfully used in solving of some problems that occurs at our industrial partners.

10. Samo za aplikativne projekte!

Označite, katerega od navedenih ciljev ste si zastavili pri aplikativnem projektu, katere konkretnе rezultate ste dosegli in v kakšni meri so doseženi rezultati uporabljeni

Cilj	
F.01	Pridobitev novih praktičnih znanj, informacij in veščin
Zastavljen cilj	<input checked="" type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
Rezultat	<input type="text"/>

	Uporaba rezultatov	<input type="button" value="▼"/>
F.02	Pridobitev novih znanstvenih spoznanj	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="button" value="▼"/>
F.03	Večja usposobljenost raziskovalno-razvojnega osebja	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="button" value="▼"/>
F.04	Dvig tehnološke ravni	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="button" value="▼"/>
F.05	Sposobnost za začetek novega tehnološkega razvoja	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="button" value="▼"/>
F.06	Razvoj novega izdelka	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="button" value="▼"/>
F.07	Izboljšanje obstoječega izdelka	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="button" value="▼"/>
F.08	Razvoj in izdelava prototipa	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="button" value="▼"/>
F.09	Razvoj novega tehnološkega procesa oz. tehnologije	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="button" value="▼"/>
F.10	Izboljšanje obstoječega tehnološkega procesa oz. tehnologije	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="button" value="▼"/>
F.11	Razvoj nove storitve	

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

	Rezultat	<input type="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="button" value="▼"/>
F.21	Razvoj novih zdravstvenih/diagnostičnih metod/postopkov	
	Zastavljen cilj	<input checked="" type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="button" value="▼"/>
F.22	Izboljšanje obstoječih zdravstvenih/diagnostičnih metod/postopkov	
	Zastavljen cilj	<input checked="" type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="button" value="▼"/>
F.23	Razvoj novih sistemskih, normativnih, programskev in metodoloških rešitev	
	Zastavljen cilj	<input checked="" type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="button" value="▼"/>
F.24	Izboljšanje obstoječih sistemskih, normativnih, programskev in metodoloških rešitev	
	Zastavljen cilj	<input checked="" type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="button" value="▼"/>
F.25	Razvoj novih organizacijskih in upravljaških rešitev	
	Zastavljen cilj	<input checked="" type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="button" value="▼"/>
F.26	Izboljšanje obstoječih organizacijskih in upravljaških rešitev	
	Zastavljen cilj	<input checked="" type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="button" value="▼"/>
F.27	Prispevek k ohranjanju/varovanje naravne in kulturne dediščine	
	Zastavljen cilj	<input checked="" type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="button" value="▼"/>
F.28	Priprava/organizacija razstave	
	Zastavljen cilj	<input checked="" type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="button" value="▼"/>
F.29	Prispevek k razvoju nacionalne kulturne identitete	
	Zastavljen cilj	<input checked="" type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="button" value="▼"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="button" value="▼"/>

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

Komentar

--

11. Samo za aplikativne projekte!

Označite potencialne vplive oziroma učinke vaših rezultatov na navedena področja

	Vpliv	Ni vpliva	Majhen vpliv	Srednji vpliv	Velik vpliv	
G.01	Razvoj visoko-šolskega izobraževanja					
G.01.01.	Razvoj dodiplomskega izobraževanja	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.01.02.	Razvoj podiplomskega izobraževanja	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.01.03.	Drugo:	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02	Gospodarski razvoj					
G.02.01	Razširitev ponudbe novih izdelkov/storitev na trgu	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	

G.02.02.	Širitev obstoječih trgov	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.03.	Znižanje stroškov proizvodnje	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.04.	Zmanjšanje porabe materialov in energije	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.05.	Razširitev področja dejavnosti	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.06.	Večja konkurenčna sposobnost	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.07.	Večji delež izvoza	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.08.	Povečanje dobička	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.09.	Nova delovna mesta	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.10.	Dvig izobrazbene strukture zaposlenih	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.11.	Nov investicijski zagon	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.12.	Drugo:	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.03	Tehnološki razvoj					
G.03.01.	Tehnološka razširitev/posodobitev dejavnosti	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.03.02.	Tehnološko prestrukturiranje dejavnosti	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.03.03.	Uvajanje novih tehnologij	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.03.04.	Drugo:	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.04	Družbeni razvoj					
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"/>	
G.05.	Ohranjanje in razvoj nacionalne naravne in kulturne dediščine in identitete	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.06.	Varovanje okolja in trajnostni razvoj	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.07	Razvoj družbene infrastrukture					
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"/>	
G.08.	Varovanje zdravja in razvoj zdravstvenega varstva	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.09.	Drugo:	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	

Komentar

--

12. Pomen raziskovanja za sofinancerje, navedene v 2. točki [12](#)

1.	Sofinancer		
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			
2.	Sofinancer		
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			
3.	Sofinancer		
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		

C. IZJAVE

Podpisani izjavljjam/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, za objavo 6., 7. in 8. točke na spletni strani <http://sicris.izum.si/> 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:

Robert Dominko	in	
podpis vodje raziskovalnega projekta		zastopnik oz. pooblaščena oseba RO

Kraj in datum: Ljubljana 11.4.2011

Oznaka poročila: ARRS-RPROJ-ZP-2011-1/105

¹ Zaradi spremembe klasifikacije družbeno ekonomskih ciljev je potrebno v poročilu opredeliti družbeno ekonomski cilj po novi klasifikaciji. [Nazaj](#)

² Samo za aplikativne projekte. [Nazaj](#)

³ Napišite kratko vsebinsko poročilo, kjer boste predstavili raziskovalno hipotezo in opis raziskovanja. Navedite ključne ugotovitve, znanstvena spoznanja ter rezultate in učinke raziskovalnega projekta. Največ 18.000 znakov vključno s presledki (približno tri strani, velikosti pisave 11). [Nazaj](#)

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

⁵ V primeru bistvenih odstopanj in sprememb od predvidenega programa 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 (obrazložitev). V primeru, da sprememb ni bilo, to navedite. Največ 6.000 znakov vključno s presledki (približno ena stran, velikosti pisave 11). [Nazaj](#)

⁶ Navedite največ pet najpomembnejših znanstvenih rezultatov projektne skupine, ki so nastali v času trajanja projekta v okviru raziskovalnega projekta, ki je predmet poročanja. Za vsak rezultat navedite naslov v slovenskem in angleškem jeziku (največ 150 znakov vključno s presledki), rezultat opišite (največ 600 znakov vključno s presledki) v slovenskem in angleškem jeziku, navedite, kje je objavljen (največ 500 znakov vključno s presledki), izberite ustrezno šifro tipa objave po Tipologiji dokumentov/del za vodenje bibliografij v sistemu COBISS ter napišite ustrezno COBISS.SI-ID številko bibliografske enote.

Navedeni rezultati bodo objavljeni na spletni strani <http://sicris.izum.si/>.

PRIMER (v slovenskem jeziku):

Naslov: Regulacija delovanja beta-2 integrinskih receptorjev s katepsinom X;

Opis: Cisteinske proteaze imajo pomembno vlogo pri nastanku in napredovanju raka. Zadnje študije kažejo njihovo povezanost s procesi celičnega signaliziranja in imunskega odziva. V tem znanstvenem članku smo prvi dokazali... (največ 600 znakov vključno s presledki)

Objavljeno v: OBERMAIER, N., PREMZL, A., ZAVAŠNIK-BERGANT, T., TURK, B., KOS, J.. Carboxypeptidase cathepsin X mediates β2 - integrin dependent adhesion of differentiated U-937 cells. Exp. Cell Res., 2006, 312, 2515-2527, JCR IF (2005): 4.148

Tipologija: 1.01 - Izvirni znanstveni članek

COBISS.SI-ID: 1920113 [Nazaj](#)

⁷ Navedite največ pet najpomembnejših družbeno-ekonomsko relevantnih rezultatov projektne skupine, ki so nastali v času trajanja projekta v okviru raziskovalnega projekta, ki je predmet poročanja. Za vsak rezultat navedite naslov (največ 150 znakov vključno s presledki), rezultat opišite (največ 600 znakov vključno s presledki), izberite ustrezni rezultat, ki je v Šifrantu raziskovalnih rezultatov in učinkov (Glej: <http://www.arrs.gov.si/sl/gradivo/sifranti/sif-razisk-rezult.asp>), navedite, kje je rezultat objavljen (največ 500 znakov vključno s presledki), izberite ustrezno šifro tipa objave po Tipologiji dokumentov/del za vodenje bibliografij v sistemu COBISS ter napišite ustrezno COBISS.SI-ID številko bibliografske enote.

Navedeni rezultati bodo objavljeni na spletni strani <http://sicris.izum.si/>. [Nazaj](#)

⁸ Navedite rezultate raziskovalnega projekta 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. [Nazaj](#)

⁹ 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](#)

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

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

¹² Rubrike izpolnite/prepišite skladno z obrazcem "Izjava sofinancerja" (<http://www.arrs.gov.si/sl/progproj/rproj/gradivo/>), ki ga mora izpolniti sofinancer. Podpisani obrazec "Izjava sofinancerja" pridobi in hrani nosilna raziskovalna organizacija – izvajalka projekta. [Nazaj](#)

Obrazec: ARRS-RPROJ-ZP/2011-1 v1.01
B1-84-3F-AD-B3-06-B4-FE-4E-05-96-BA-80-86-70-F0-45-C5-2D-C7