

Oznaka poročila: ARRS-RPROJ-ZP-2013/114



ZAKLJUČNO POROČILO RAZISKOVALNEGA PROJEKTA

A. PODATKI O RAZISKOVALNEM PROJEKTU

1. Osnovni podatki o raziskovalnem projektu

Šifra projekta	J2-2077
Naslov projekta	Kemija novih multiferoičnih spojin
Vodja projekta	11991 Matjaž Valant
Tip projekta	J Temeljni projekt
Obseg raziskovalnih ur	4173
Cenovni razred	C
Trajanje projekta	05.2009 - 04.2012
Nosilna raziskovalna organizacija	1540 Univerza v Novi Gorici
Raziskovalne organizacije - soizvajalke	
Raziskovalno področje po šifrantu ARRS	2 TEHNIKA 2.04 Materiali 2.04.01 Anorganski nekovinski materiali
Družbeno-ekonomski cilj	06. Industrijska proizvodnja in tehnologija

2. Raziskovalno področje po šifrantu FOS¹

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

B. REZULTATI IN DOSEŽKI RAZISKOVALNEGA PROJEKTA

3. Povzetek raziskovalnega projekta²

SLO

Multiferoiik je ime za materiale, ki izkazujejo sklopljene električne, magnetne in strukturne ureditvene parametre. To se odraža v sočasni feroelektričnosti, feromagnetizmu in/ali feroeleastičnosti. Običajno to opisujemo s sklopitvijo med spinskim in dipolnim urejanjem, kar pa se z ozirom na osnovne kristalografske principe izključuje in je mogoče le v posebnih primerih. Zaradi tega so multiferoične spojine razmeroma redke in trenutno večinoma omejene

na ferite in manganite. Res pa je tudi, da so fizikalni vidiki multiferroikov zelo dobro raziskani medtem, ko so raziskave na področjih kemije trdnega stanja multiferroikov, veliko manj intenzivne. Eno takšnih področij je sintezna kemija multiferroičnih spojin, ki vsebujejo katione z atipičnim valenčnim stanjem. Tukaj definiramo katione z atipičnim valenčnim stanjem kot katione, katerih valenčno stanje v oksidu ni termodinamsko stabilno pri sobnih pogojih. Primeri takšnih kationov so $W_{4+,5+}$, $Mo_{4+,5+}$ in $V_{3+,4+}$. Vsi ti našteti kationi imajo spinski magnetni moment oziroma tendenco po odkliku iz ravnotežnih leg (i.e. off-centering). V spojinah se lahko takšni kationi stabilizirajo v kristalnem polju kristalne mreže ali preko elektronske interakcije z ostalimi kationi.

Temeljni cilj projekta je sistematično raziskati možnost sinteze novih multiferroičnih spojin v faznih področjih molibdatov, volframatov, vanadatov in podobnih kationov z atipičnim valenčnim stanjem, kjer se pričakuje spinski magnetni moment. Sintezo bomo osredotočili na nekaj strukturnih tipov, ki dovoljujejo pojav feroelektričnosti in magnetnega urejanja kot so npr. perovskiti, piroklori, volframove bronze in Auriviliusove faze. Študirali bomo možnost vgradnje kationov s samskim elektronskim parov, kot so Bi_{3+} , Pb_{2+} , Sb_{3+} in Te_{4+} , na A-mesta kristalnih struktur, ki na B-mestih vsebujejo katione z atipičnim valenčnim stanjem kot so npr. $Mo_{4+,5+}$, $V_{3+,4+}$ in $W_{4+,5+}$. Na tak način bomo inducirali veliko stopnjo popačitve kristalne mreže, odklik od ravnotežnih leg ter zmanjšanje simetrije v kombinaciji s spinskim magnetnim momentom. To pa so osnovne karakteristike potrebne za multiferroično urejanje.

Materiali s sklopljeno električno, magnetno in strukturno ureditvijo, ki se kaže v hkratni prisotnosti forelektričnosti, (anti)feromagnetizma, oziroma feroelestičnosti, ponujajo ogromne možnosti za razvoj novih aplikacij. Novi funkcionalni multiferroiki so pomembni in potrebni na področjih informatike, senzorjev, telekomunikacije, medicine itd. Omogočen bo bistven napredek v razvoju varnostnih sistemov v transportu (magnetni kompas, magnetni senzor, alarmni sistemi), avtomobilske tehnologije (kontrola gibljivih delov, nadzor nad vozilom in prometom, nadzor nad vrtenjem koles in prestavnih sklopov...), medicine (diagnostika na čipu, bio-kompatibilni senzori). Iz tega projekta pridobila akademsko raziskovalna sfera koristne temeljne rezultate, industrija pa potencialni nov sistem funkcionalnih materialov.

ANG

'Multiferroic' is a term given to materials that exhibit coupled electric, magnetic and structural order parameters that result in simultaneous ferroelectricity, ferromagnetism and/or ferroelasticity. This is often described as a coupling between the spin and dipole ordering, which, however, is forbidden by basic crystallographic principles and only allowed in special cases. Therefore, the multiferroic compounds are rather rare and, at present, mainly limited to manganites and ferrites. It is also true that physical aspects of the multiferroics are being well explored whereas research in the field of solid-state chemistry is not so intense. In fact, many research fields within solid-state chemistry, related to multiferroics, are still unexplored. One such field is the synthetic chemistry of multiferroic compounds composed of cations with an unconventional valence state. Here we define the cations with unconventional valence state as cations, which valence state in an oxide compound is thermodynamically unstable in air at room temperature and atmospheric pressure. Examples of such ions are Te_{6+} , $W_{4+,5+}$, $Mo_{4+,5+}$ and $V_{3+,4+}$. They all possess spin magnetic moment and/or tendency for off-centering. Within a compound such cations can be stabilized in the crystal field of the structure or by electronic interactions with other type of cations.

The main project goal is to investigate systematically a compositional field of molybdates, tungstates, vanadates and other ions with unconventional valence state, which exhibit spin magnetic moment, in order to synthesize new multiferroic compounds. The synthesis will primarily focus in few structural families that have been previously recognized to allow for ferroelectricity and/or magnetic ordering, i.e. perovskites, pyrochlores, tungsten bronzes and Aurivilius phases. We will study a possibility of A-site incorporation of lone-electron pair cations such as Bi_{3+} , Pb_{2+} , Sb_{3+} and Te_{4+} into crystal lattice together with B-site ions with unconventional valence state, e.g. $Mo_{4+,5+}$, $V_{3+,4+}$ and $W_{4+,5+}$. In such a way we will induce a high lattice distortion, off-centering and symmetry breaking in combination with spin magnetic moment. These are the essential characteristics required for the multiferroic ordering.

Materials that exhibit coupled electric, magnetic and structural order parameters that result in simultaneous ferroelectricity, (anti)ferromagnetism and ferroelasticity offer enormous potential to future industry. The beneficiaries of the research will be the academic research community as well as industry. The new advanced functional multiferroics will be important for the fields of information technology, sensors, telecommunications, medicine etc. These applications range from the traditional applications such as aerospace and safety in transport, automotive sector

to life sciences. The main beneficiaries of our research will be community of researchers, gaining from new fundamental recognitions, and industrial segment, gaining from a new multifunctional electronic material.

4. Poročilo o realizaciji predloženega programa dela na raziskovalnem projektu³

Pri raziskavah potencialnih multiferoikov smo se osredotočili na študij spinskega urejanje v dopiranem KTaO_3 . Povod za to delo so bili članki objavljeni v najpomembnejši fizikalni periodiki, ki opisuje obstoj spinskega stekla v Mn: KTaO_3 pri kriogenih pogojih. Raziskav smo se lotili z natančnim študijem izhodiščne kristalne faze KTaO_3 . Zelo natančno smo analizirali sintezo in procesiranje tega kvantnega paraelektrika. Kot prvi smo uspeli pripraviti KTaO_3 keramiko s 85% relativno gostoto. Določili smo aktivacijsko energijo sintranja, ki je izredno visoka – kar štirikrat višja od TiO_2 . Analizirali smo nizkotemperaturne mikrovalovne lastnosti ter prvi opazili dielektrično relaksacijo pri 15K. Raziskave smo nadaljevali s študijem dopiranja KTaO_3 z Mn, ki v sistem vnese nove dipolne momente ter magnetni spinski moment. Določili smo mehanizme vgrajevanje Mn^{2+} in Mn^{4+} v KTaO_3 rešetko ter pogoje za procesiranje takšne keramike. S študijem mikrovalovnih dielektričnih lastnosti smo potrdili uspešen substitucijo. V nadaljnjem delu smo pokazali, da spinsko urejanje v Mn: KTaO_3 ni intrinzičnega značaja. Opažena magnetna anomalija je posledica prisotnosti nezreagirane Mn_3O_4 in ne odraža nikakršnega spinskega urejanja v sami rešetki dopiranega KTaO_3 tako kot je to opisano v dosedANJI znanstveni literaturi. To smo uspeli nedvoumno dokazati tako, da smo z visoko energetske metodo procesiranja pripravili KTaO_3 dopiran z Mn, ki ni vseboval nezreagirane Mn_3O_4 ter posledično tudi nikakršne magnetne anomalije pri kriogenih temperaturah.

Odkrili dve novi spojini: spojino piroklorne tipa s področje homogenosti $(\text{Bi}_{2-x}\text{Fe}_x)(\text{Fe}_{1.42}\text{Te}_{0.58})\text{O}_{6.87}$ ter $\text{Bi}_3(\text{Fe}_{0.56}\text{Te}_{0.44})_3\text{O}_{11}$, ki ima kristalno strukturo KSbO_3 tipa. Posebej natančno smo analizirali kristalno strukturo in lastnosti piroklorne spojine. Jedrsko in magnetno strukturo smo opravili s kombinirano Rietveld analizo na rentgenskih in nevtronskih difrakcijskih posnetkih, ki smo jih opravili na žarkovni liniji v Los Alamos National Laboratories. Ugotovili smo, da je piroklor pozicijsko popačen z odmikom A kationov na 96g pozicijo in O' na 32e pozicijo v prostorski skupini $Fd\bar{m}$ ($a = 10.38804(3) \text{ \AA}$). To bistveno vpliva na lastnosti in povzroči izrazito dielektrično relaksacijo pri okoli 100K, ki v mikrovalovnem frekvenčnem območju povišuje dielektrične izgube. Magnetne meritve so pokazali, da pri okoli 20K pride do spinske zamrznitve v spinsko steklo. Temperatura zamrznitve se sistematično spreminja z vsebnostjo Fe v tej spojini. Z difuzno UV-Vis reflektanco smo izmerili širino prepovedanega pasu, ki 1.965 eV, kar uvršča te piroklore med zanimive materiale za fotokatalitske aplikacije cele za področje vidne svetlobe. Raziskali smo celotno področje homogenosti piroklorne spojine v sistemu Bi_2O_3 - Fe_2O_3 - TeO_3 ter določili termodinamska razmerja s sosednimi fazami. Magnetne in dielektrične meritve so pokazale na zelo sistematično spreminjanje lastnosti teh piroklorov v odvisnosti od sestave. Dielektričnost narašča z višanjem vsebnosti Bi od 37 do 55. Z UV-vis disperzijsko reflektanco smo izračunali širino prepovedanega pasu. Najožji prepovedan pas ima sestava z največjo vsebnostjo železa. Ta znaša 1.965eV. Poleg omenjene piroklorne spojine smo v tem faznem diagramu našli še spojino s stohiometrično formula $\text{Bi}_3(\text{Fe}_{0.56}\text{Te}_{0.44})_3\text{O}_{11}$, ki kristalizira v KSbO_3 -tipu kristalne strukture s pozicijskim neredom in kubično simetrijo z osnovno celico 9.47045(15) Å. Magnetne meritve do kriogenih temperatur niso pokazale na spinsko sklopitev.

Intenzivno smo raziskavali še eno novo, potencialno multiferoično, spojino. V skupini

perovskitnih spojin na osnovi bizmuta sta posebej izpostavljeni BiFeO_3 in BiMnO_3 , ki sta do sedaj najbolj raziskana multiferoika. BiFeO_3 izkazuje celo multiferoičnost pri sobni temperaturi. Naslednji v isti periodi je BiVO_3 , ki pa do sedaj še ni bil sintetiziral in zato tudi ne poznamo njegovih lastnosti. V takšnem perovskitu pričakujemo multiferoično obnašanje, ki izhaja iz pozicijskega odklona Bi ionov (feroelektričnost) in nesklapljenih spinov V^{3+} ionov. V okviru projekta smo začeli s teoretičnimi in eksperimentalnimi raziskavam te spojine.

Najprej smo s pomočjo empiričnih zvez nato pa tudi z DFT modeliranjem dokazali, da je spojina BiVO_3 , pri kateri ima vanadij valenco $3+$, termodinamsko stabilna. Z geometrijsko optimizacijo smo določili perovskitno strukturno popačenje ter prostorsko skupino. Teoretične raziskave smo nadaljevali naprej v smeri optimizacije baznih setov in izbora kristalnih modelov s hibridnimi funkcionali ter določitvijo natančnosti izračunov mreže k-točk in tolerančnih parametrov zasedenosti kristalnega sistema. Izračunali smo osnovno stanje valovnih funkcij in vizualizirali geometrijo. V eksperimentalnem delu študija smo se posvetili določevanju parametrov ter procesov kemijske reakcije med Bi^{3+} in V^{3+} . Izvedli smo sistematično analizo redukcije V^{5+} v V^{3+} , kar bi nam omogočilo sintezo BiVO_3 iz prekursorja BiVO_4 . Izkazalo se je, tako kot za direktno sintezo iz trdnega stanja, da se pred reakcijo Bi^{3+} in V^{3+} izvrši elektronski prehod iz vanadija na bizmut. Dobimo kovinski bizmut ter V^{5+} kar zavre nadaljno sintezo BiVO_3 . Na tak način smo natančno identificirali problem, ki onemogoča sintezo BiVO_3 pri povišani temperature. V nadaljnjem delu se želimo temu izogniti s sintezo pod hidrotermalnimi pogoji.

Izvedli smo tudi analizo Mn-dopiranega SrTiO_3 , za katerega so poročali o obstoju stanja spinskega stekla, ki je magnetoelektrično sklopljeno s stanjem dipolnega stekla. Naša analiza substitucijskega mehanizma na mestih A in B v perovskitni matrici je pokazala na izrazit vpliv procesnih parametrov na vgrajevanje Mn. Kvantitativno smo določili vpliv temperature in parcialnega tlaka kisika na porazdelitev Mn v kristalni strukturi SrTiO_3 . Presenetljivo smo ugotovili, da v primeru, ko je sinteza izvedena pod optimalnimi pogoji, takšen material ne kaže nobene spinske sklopitve. Samo v primeru nepravilnega procesiranja, ki vodi v nenačrtovano porazdelitev Mn ionov, se sklopitev pojavi. To je povezano s pojavom velike koncentracije dislokacij, ki so povezane z lokalno segregacijo Mn ionov. Dokazali smo, da je spinska sklopitev v tem sistemu ekstrinzičnega značaja in ne lastna kot se je pred tem predvidevalo.

V raziskavah redčenih magnetnih oksidov se osredotočamo na spojino BaTiO_3 , dopirano s Fe. Barijev titanat je dobro poznan feroelektričen material s perovskitno strukturo. Znano je, da dopiranje barijevega titanata z železovimi ioni vodi do feromagnetizma, vendar pa narava magnetizacije v tem materialu še vedno ni povsem jasna, zato so potrebne nadaljnje raziskave o obstoju lastnega feromagnetizma v tem materialu. Iz rezultatov naših analiz lahko zaključimo, da Fe^{3+} atomi zamenjajo Ti^{4+} atome na B strani perovskitne mreže BaTiO_3 hkrati pa se strukturno urejajo kar inducira feromagnetizem in s tem najverjetneje tudi multiferoično sklopitev.

Ploskovno centrirane tetragonalne (fct) faze binarnih zlitin kot so CoPt, FePd in FePt, imenovane tudi CuAu(I) ali L1_0 faze, so pritegnile veliko zanimanja v zadnjih letih. Magnetne lastnosti tankih filmov FePt zlitin, kot so visoka koercitivnost, visoka nasičena magnetizacija in veliko pravokotno anizotropijo, so odprle nove perspektive za miniaturizacijo shranjevalnih naprav. L1_0 je kristalografski derivat fcc strukture. To fazo lahko opišemo kot zaporedje monoatomskih ravnin dveh elementov. Ko raste z atomskimi plastmi vzporedne z ravnino filma, to je s c-osjo FCT osnovne celice vzporedno z normalno smerjo filma, ta struktura kaže na pravokotno magnetno anizotropijo. Popolnoma urejen FePt kaže na eno največjih virov energije magnetne anizotropije ($1.6 \times$

10^8 erg/cm^3). Anizotropije energij $> 10^8 \text{ erg/cm}^3$ so bile ugotovljene eksperimentalno v FePt filmih, ki so nastali z molekularno žarkovno epitaksijo (MBE). Ti materiali so zanimivi kandidati za vloge medijev v magnetno-optičnemu snemanju. Magnetne lastnosti FePt so močno povezane s strukturnimi lastnostmi materiala, tj. kristalografsko orientacijo v filmu, stopnjo kemične urejenosti in stopnjo epitaksije. Epitaksijska rast kemično urejenih FePt tankih filmov s c-osjo pravokotno na ravnino z MBE in magnetronskim razprševanjem je bila predhodno dokazana. Vsi ti filmi so zrasli na izolacijskih MgO podlagah pri visoki temperaturi žarjenja, kar kaže na razgradnjo [001] teksture enoplastnih FePt filmov in povzroči, da se zrna oblikujejo v večje delce. Z vidika magnetnih-elektronskih aplikacij, je kombinacija kovinskih feromagnetnih materialov s polprevodnimi/kovinskimi podlagami preferenčna. Ker je mrežna neuskkljenost med Rh (100) površino in FePt $L1_0$ zlitino približno 1.3 %, smo izbrali to površino kot sejalno podlago za rast FePt zlitine. Rh (100) površina je primerna tudi iz kemijskega vidika, saj ni pričakovati nastajanja zlitin med Pt in Rh pri temperaturah uporabljenih v tem poskusu. Laboratorij za raziskave materialov je sodeloval v raziskovalnih dejavnostih, kjer smo preučevali rasti elektronskih lastnosti tankih plasti FePt, pridelanih na Rh (100) površini, s pomočjo fotoelektronske spektroskopije na VUV žarkovni liniji na Elettra-sinhrotronu v Trstu. Skoraj ekvatomski filmi FePt so bili vzgojeni z izmeničnim odlaganjem Fe in Pt plasti, z namenom, da se spodbudi nastanek $L1_0$ faze pri relativno nizki temperaturi (380°C). Nastajanje zlitin smo spremljali z meritvami Fe in Pt osnovnih ravni. Tvorjenje FePt zlitin povzroča dobro ločljive komponente v $4f_{7/2}$ fotoemisijemskem spektru. S tem raziskovalnim delom smo ugotovili pogoje za rast *in-situ* FePt filmov na Rh (100).

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

Projekt je potekal uspešno in doseženi so bili vsi projektni cilji. V okviru smo raziskali sledeče sisteme: Mn-dopiran KTaO_3 , Mn-dopiran SrTiO_3 , sistem $\text{Bi}_2\text{O}_3\text{-Fe}_2\text{O}_3\text{-TeO}_3$ z novima spojinama $(\text{Bi}_{2-x}\text{Fe}_x)(\text{Fe}_{1.42}\text{Te}_{0.58})\text{O}_{6.87}$ ter $\text{Bi}_3(\text{Fe}_{0.56}\text{Te}_{0.44})_3\text{O}_{11}$, spojino BiVO_3 , sistem $\text{Bi}_2\text{O}_3\text{-Nd}_2\text{O}_3\text{-V}_2\text{O}_5$ in Fe-dopiran BaTiO_3 .

V okviru projekta smo objavili 14 člankov v vrhunskih znanstvenih revijah, med drugim tudi v dva v *Adv Funct Mater* (IF=10.179), dva v *Phys. Rev. Lett.* (IF=7.37) in dva v *Chem. Mater.* (IF=7.286). Prof. Valant je imel pet vabljenih predavanj na mednarodnih konferencah na osnovi rezultatov pridobljenih v okviru tega projekta.

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

Ni bilo sprememb programa raziskovalnega projekta ali sestave projektne skupine.

7. Najpomembnejši znanstveni rezultati projektne skupine⁶

Znanstveni dosežek			
1.	COBISS ID	1422075	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Spinsko urejanje v KTaO_3 dopiranem z Mn?
		ANG	Spin ordering in Mn-doped KTaO_3
Opis	SLO	Magnetno urejanje v Mn-dopiranem KTaO_3 smo raziskovali kot funkcijo vsebnosti Mn in pogojem termične obdelave. Čeprav smo zaznali antiferomagnetno urejanje pri nizkih temperaturah (42K) smo pokazali, da to urejanje ni lastno urejanje v perovskitni kristalni rešetki, ki bi imelo značaj urejanja na dolge razdalje ali spinskega stekla, kot to pogosto trdijo v znanstveni literaturi. Predstavili smo eksperimentalne dokaze, da so	

		opaženi magnetni efekti ekstrisičnega izvora in izhajajo iz ostankov nezreagirane Mn ₃ O ₄ .
	ANG	Magnetic ordering in Mn-doped KTaO ₃ was investigated as a function of Mn-content and processing route. Although we have detected the antiferromagnetic ordering at low temperature (42K) we showed that its origin is not in intrinsic long-range nor spin-glass ordering of Mn spins in the KTaO ₃ host lattice as often claimed in literature. We present evidences that the ordering is of an extrinsic nature and originates from traces of residual Mn ₃ O ₄ not incorporated into the KTaO ₃ matrix.
Objavljeno v		The Society; Chemistry of materials; 2010; Vol. 22, no. 6; str. 1952-1954; Impact Factor: 6.397; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.13; A'': 1; A': 1; WoS: EI, PM; Avtorji / Authors: Valant Matjaž, Kolodiazhnyi Taras, Axelsson Anna-Karin, Babu Gunda Santosh, Alford Neil McN.
Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek
2.	COBISS ID	1894907 Vir: COBISS.SI
Naslov	SLO	Novi (Bi _{1.88} Fe _{0.12})(Fe _{1.42} Te _{0.58})O _{6.87} piroklor s prehodom v spinsko steklo
	ANG	New (Bi _{1.88} Fe _{0.12})(Fe _{1.42} Te _{0.58})O _{6.87} pyrochlore with spin-glass transition
Opis	SLO	Poročali smo o odkritju nove piroklorne spojine (Bi _{1.88} Fe _{0.12})(Fe _{1.42} Te _{0.58})O _{6.87} , ki od vseh do sedaj znanih piroklorov, vsebuje največ železa. Z rentgensko in nevtronsko difrakcijsko analizo, smo določili kristalografske značilnosti. Pri 20K ta piroklor razvije močno spinsko sklopitev, in kaže karakteristike spinskega stekla. Ravno pri tej temperaturi smo zaznali tudi vpliv magnetne sklopitve na dielektrične lastnosti kar potrjuje, da smo odkrili material z magnetoelektrično sklopitvijo.
	ANG	We reported on discovery of a new pyrochlore compound, (Bi _{1.88} Fe _{0.12})(Fe _{1.42} Te _{0.58})O _{6.87} , which is characterized by the highest Fe content among all known pyrochlores. using x-ray and neutron diffraction we determined its crystallographic properties. At 20K the pyrochlore developed strong spin coupling into the spin glass state. At tis temperature the influence of the magnetic coupling on dielektrik properties was shown, which confirms the magnetoelectric coupling.
Objavljeno v		The Society; Chemistry of materials; 2011; Vol. 23, no. 10; str. 2619-2625; Impact Factor: 7.286; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.27; A'': 1; A': 1; WoS: EI, PM; Avtorji / Authors: Babu Gunda Santosh, Valant Matjaž, Page Katharine, Llobet Anna, Kolodiazhnyi Taras, Axelsson Anna-Karin
Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek
3.	COBISS ID	2265083 Vir: COBISS.SI
Naslov	SLO	Izvor magnetizma v Mn-dopiranemu SrTiO ₃
	ANG	The origin of magnetism in Mn-doped SrTiO ₃
Opis	SLO	SrTiO ₃ velja za enega od najbolj kvantnih paraelektrikov, ki mu je mogoče z dopiranjem inducirati feroelektrično stanje. Mi smo posebno pozornost namenili vplivu dopiranja z paramagnetnima ionoma Mn ²⁺ in Mn ⁴⁺ na magnetne lastnosti, pri čemer smo natančno raziskovali mehanizem vgrajevanja Mn. Posledično smo prišlo do presentljivih spoznanj o vplivu procesnih parametrov na te atomistične mehanizme vgrajevanja ter o odsotnosti magnetizacije v primeru idealnega vgrajevanja dopanta. To zavrača dosedaj znane teorije o lokalnih poljih v tem materialu zaradi česa je to naše delo bilo deležno velikega odmeva in sprejeto v objavo v tak zelo odmevni reviji kot je Advanced Functional Materials

		<p>SrTiO₃ is considered to be one of the most interesting quantum paraelectrics, which ferroelectric state can be induced by doping. We have paid special attention to the influence of doping with paramagnetic ions Mn²⁺ and Mn⁴⁺ on the magnetic properties. Within this study we have investigated in details the incorporation mechanisms of dopants; among them Mn. The study resulted in some surprising results on influence of the processing parameters on the atomistic mechanisms of the incorporation and the absence of magnetization in the case of an ideal dopant incorporation. This contradicts and disproves current theories on local fields in this material and, therefore, our work has attracted huge interest and was published in such respected journal as Advanced Functional Materials is.</p>	
	Objavljeno v	<p>Wiley Interscience; Advanced functional materials; 2012; Vol. 22, no. 10; str. 2114-2122; Impact Factor: 10.179; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.27; A'': 1; A': 1; WoS: DY, EI, NS, PM, UB, UK; Avtorji / Authors: Valant Matjaž, Kolodiazhnyi Taras, Arčon Iztok, Aguesse Frederic, Axelsson Anna-Karin, Alford Neil McN.</p>	
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek	
4.	COBISS ID	1968635	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO Spectralne funkcije izoliranih Ce adatomov na paramagnetni površini	
		ANG Spectral functions of isolated Ce adatoms on paramagnetic surfaces	
	Opis	<p>SLO Poročali smo o fotoemisijemskem eksperimentu, ki je razkril celotno valečno elektronsko spektralno funkcijo Ce adatomov na Ag(111), W(110) in Rh(111) površinah. Prehod Ce 4f spektralne teže iz ionizacijskega vrha na Fermijev nivo je opazen pri spremembi substrata iz Ag(111) na Rh(111). Vmesni primer, ki ga predstavlja Ce na W(110), kaže cepitev ionizacijskih vrhov. Ta razvoj spektrov lahko razložimo z metodami teorije iz osnovnih principov, kar očitno kaže na dejstvo, da so za zanesljivo razumevanje magnetnih adatomov na kovinskih površinah potrebno tako nizko kot visoko energijske spektroskopske informacije.</p>	
		<p>ANG We reported photoemission experiments revealing the full valence electron spectral function of Ce adatoms on Ag(111), W(110), and Rh(111) surfaces. A transfer of Ce 4f spectral weight from the ionization peak towards the Fermi level is demonstrated upon changing the substrate from Ag(111) to Rh(111). In the intermediate case of Ce on W(110) the ionization peak is found to be split. This evolution of the spectra is explained by means of first-principles theory, which clearly demonstrates that a reliable understanding of magnetic adatoms on metal surfaces requires simultaneous low and high energy spectroscopic information.</p>	
	Objavljeno v	<p>American Physical Society.; Physical review letters; 2011; Vol. 107, no. 2; str. 026801-1-026801-4; Impact Factor: 7.370; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.404; A'': 1; A': 1; WoS: UI; Avtorji / Authors: Gardonio Sandra, Wehling T. O., Petaccia L., Lizzit S., Vilmercati Paolo, Goldoni A., Karolak M., Lichtenstein A. I., Carbone Carlo</p>	
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek	
5.	COBISS ID	21319398	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO Sintezne posebnosti perovskite BiVO ₃	
		ANG Synthesis peculiarities of BiVO ₃ perovskite	
	Opis	<p>SLO Eksperimentalno smo raziskovali sintezo perovskita BiVO₃. Ugotovili smo, da je redox reakcija v trdnem stanju preprečuje tvorbo BiVO₃. Pri povišanih temperaturah namreč Bi³⁺ oksidira v V³⁺, kar vodi do tvorbe kovinskega bizmuta in zvrsti z V⁵⁺. Ta proces prevladuje pre formiranjem BiVO₃. Perovskitna struktura BiVO₃ zahteva močno orbitalno sklopitev med Bi³⁺ in V³⁺. Pri raziskovanih temperaturah sinteze (>400°C) je aktivacijska</p>	

		energija za elektronski transfer od V na Bi presežena in s tem perovskitna struktura destabilizirana. Vendar pa je verjetno, da je sinteza mogoča pri nižjih temperaturah, pri katerih aktivacijska energija za to redoks reakcijo ni presežena
	ANG	We have experimentally investigated the synthesis of BiVO ₃ perovskite. We identified the solid-state redox reaction as a process that averts the formation of BiVO ₃ . At elevated temperatures, Bi ³⁺ oxidizes V ³⁺ to yield metallic Bi and V ⁵⁺ species. This process prevails over the formation of BiVO ₃ . The BiVO ₃ perovskite structure requires a strong orbital coupling between Bi ³⁺ and VO ₆ octahedra but this facilitates the electron transfer between V ³⁺ and Bi ³⁺ . At the investigated temperatures (>400 °C), the activation energy for the electron transfer from V to Bi is exceeded and the structure is destabilized, but the synthesis of BiVO ₃ might be possible at lower temperatures for which the activation energy for the redox reaction is not exceeded.
Objavljeno v		Ceramurgica s.p.a.; Ceramics international; 2012; 4 str; Impact Factor: 1.751; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 0.774; A': 1; WoS: PK; Avtorji / Authors: Dragomir Mirela, Valant Matjaž
Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek

8. Najpomembnejši družbeno-ekonomski rezultati projektne skupine⁷

	Družbeno-ekonomski dosežek	
1.	COBISS ID	245427712 Vir: COBISS.SI
	Naslov	<p>SLO Organizacija konference z naslovom Slovenska konferenca o materialih in tehnologijah za trajnostni razvoj, Ajdovščina, 11-12 maj, 2009</p> <p>ANG Conference Organized - title of conference "Slovenian Conference on Materials and Technologies for Sustainable Growth, Ajdovščina, Slovenija, May 11.-12, 2009</p>
	Opis	<p>SLO Organizator konference je bila Univerza v Novi Gorici, Laboratorij za raziskave materialov pod konferenčnim predsedovanjem prof. Matjaža Valant. Konferenca je bila namenjena dveh problematikam trajnostnega razvoja: razvoja materialov in tehnologij za ohranjanje okolja in o učinkoviti rabi energije. Potekala je od 11. in 12. maja 2009 v Univerzitetnem središču Ajdovščina. Udeležilo se jo je 67 udeležencev iz Slovenije, Hrvaške, Italije, Avstrije in Češke.</p> <p>ANG Conference was organized by Materials Research Laboratory of University of Nova Gorica. The programme of the conference included two topics of sustainable growth: development of materials and technologies for environment protection and alternative energy use. The conference was held from 11. to 12. of May 2009 in University Center Ajdovščina. It was attended by 67 participants from Slovenia, Croatia, Italy, Austria and Czech Republic.</p>
	Šifra	B.01 Organizator znanstvenega srečanja
	Objavljeno v	Slovenska konferenca o materialih in tehnologijah za trajnostni razvoj, Ajdovščina, 11.-12. maj 2009, VALANT, Matjaž (ur.), PIRNAT, Urša (ur.). Knjiga povzetkov. Zbornik. : Založba Univerze v Novi Gorici, 2009. Člani organizacijskega/programskega odbora konference, VALANT, , PIRNAT, LAVRENČIČ ŠTANGAR, et al. Nova Gorica: Univerza v Novi Gorici, 2009
	Tipologija	2.30 Zbornik strokovnih ali nerecenziranih znanstvenih prispevkov na konferenci
2.	COBISS ID	1811707 Vir: COBISS.SI

	Naslov	SLO	Radijska oddaja Alternativni viri energije
		ANG	Radio program Alternative Energy Sources
	Opis	SLO	V radijski oddaji Ekološke novice: Alternativni viri energije smo v pogovoru z novinarjem diskutirali o energiji, njeni izrabi, fosilnih gorivih, vrsti in možnostih izrabe alternativnih virov energije. Posebno pozornost smo namenili tehnologijam v razvoju in perspektivam izrabe alternativnih virov energije
		ANG	In the radio program Ecologic News: Alternative Energy Sources we have discussed with the journalist the issues related to energy, its use, fossile energy sources, different alternative sources of energy etc. A special attention was paid to the technologies that are currently in development and possibilities for the exploitation of alternative energy sources.
	Šifra	B.06	Drugo
	Objavljeno v	Radio Koper; 2010; 1 CD (22 min); Avtorji / Authors: Valant Matjaž	
	Tipologija	2.19 Radijska ali televizijska oddaja	
3.	COBISS ID	1174523	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Vpliv točkovnih defektov v KTaO3 kristalni strukturi na nizkotemperaturne dielektrične relaksacije
		ANG	Influence of point defects in KTaO3 crystal structure on low-temperature dielectric relaxation
	Opis	SLO	V vabljenem predavanju smo predstavili študijo o vplivu isovalentnega in alivalentnega dopiranja KTaO3 na njegove dielektrične lastnosti s poudarkom na študiju karakteristik polarnih nanodome, ki se ustvarijo v okolici dopanta. Njihov dipolni moment in lokalna kristalografska popačitev ima zelo karakterističen vpliv na obnašanje dielektričnih lastnosti v kriogenem področju.
		ANG	In the invited talk we have presented a study on influence of isovalent and aliovalent doping of KtaO3 on its dielectric properties with emphasis on studies of polar nanodomain characteristics that are formed around the dopant species. Their dipole moment and local crystallographic distortion significantly influences cryogenic dielectric properties.
	Šifra	B.04	Vabljeno predavanje
	Objavljeno v	Ovidius University Press; Book of abstracts; 2009; Str. 48; Avtorji / Authors: Valant Matjaž, Axelsson Anna-Karin, Alford Neil McN.	
	Tipologija	1.10 Objavljeni povzetek znanstvenega prispevka na konferenci (vabljeno predavanje)	
4.	COBISS ID		Vir: vpis v poročilo
	Naslov	SLO	Delavnica z naslovom Elletra@sungren.ung.si
		ANG	Workshop with the title Elletra@sungren.ung.si
	Opis	SLO	V univerzitetnem kampusu Univerze v Novi Gorici smo organizirali delavnico na katero smo povabili predstavnike Sinhrotrona Elletra, da nam predstavijo svoje aktivnosti in raziskovalno infrastrukturo. Na delavnici smo imeli 15 predavanj raziskovalcev iz Elletre in UNG. Delavnica nam je služila kot izhodiščna točka za vzpostavitev zelo širokega raziskovalnega partnerstva. Udeleženci so se strinjali, da se uspešno sodelovanje in izmenjevanje znanj nadaljuje ter se v bližnji prihodnosti nadgradi z raziskovalnimi projekti za koriščenje žarkovne linije na sinhrotronu Elletra.
		ANG	At the University Campus of Ajdovscina of University of Nova Gorica we organized a workshop, for which we invited representatives of Synchrotron Elletra to present their activities and facilities to reseachers of UNG. The workshop consisted of 15 presentations of participant from Elletra and UNG. The workshop served as a starting point for the establishment of

		diverse research partnerships. All the participants agreed on continuing the exchange of know in the near future with the objective of preparing beamtime proposals for asking access to the Elettra beamline facilities in the next semester.
Šifra	B.01	Organizator znanstvenega srečanja
Objavljeno v	N/A	
Tipologija	3.13	Organiziranje znanstvenih in strokovnih sestankov
5.	COBISS ID	1751547 Vir: COBISS.SI
Naslov	SLO	Vabljeni predavanje na mednarodni konferenci "Nova generacija funkcionalnih piroklorov-magnetni polprevodni piroklori"
	ANG	Invited talk at an international conferernce "New generation of functional pyrochlores-Magnetic Semiconductor Pyrochlores"
Opis	SLO	Na mednarodni konferenci z naslovom Microwave Materials and Their Applications 2010, ki je bila organizirana v Varšavo na Poljskem od 1-3. septembra 2010 je prof. valant podal vabljeni predavanje z naslovom "New Generation of Functional pyrochlore - Magnetic Semiconductor Pyrochlores" V predavanju je opisal funkcionalne lastnosti nekaterih magnetno in geometrijsko frustriranih piroklorov ter to nadgradil z analizo funkcionalnih lastnosti spinskega magnetnega piroklora (BiFe)(FeTe)O7, ki je bil odkrit v sklopu tega projekta.
	ANG	At an international conference Microwave Materials and Their Applications 2010 that was organized in Warsaw, Poland, prof. Valant gave an invited talk with the title "New Generation of Functional pyrochlore - Magnetic Semiconductor Pyrochlores". In his talk Prof. Valant has reviewed functional properties of some magnetically and geometrically frustrated pyrochlores and continued with analysis of spin glass pyrochlore, (BiFe)(FeTe)O7, that has been discovered within this research project.
Šifra	B.04	Vabljeni predavanje
Objavljeno v		Faculty of Electronics and Information; [Book of abstracts]; 2010; Str. 34-35; Avtorji / Authors: Valant Matjaž, Babu Gunda Santosh, Axelsson Anna-Karin, Kolodiazhnyi Taras, Krupka Jerzy
Tipologija	1.10	Objavljeni povzetek znanstvenega prispevka na konferenci (vabljeni predavanje)

9. Drugi pomembni rezultati projektne skupine⁸

Prodobitev projekta 7FP Regional Potentials
7FP projekt RegPot-CT-2011-28606 Strengthening University of Nova Gorica Research Potential in Environmental Sciences and Novel Nanomaterials,

Koordinator: Matjaž Valant

Projekt je namenjen krepitvi raziskovalnih kapacitet s področja okoljski zanosti in novih nanomaterialov. Najpomembnejši kriterij Evropske komisije za dodelitev tega projekta je že obstoječa znanstveno odličnost raziskovalnih skupin in potencial, da se s projektnim denarjem razvijejo v evropski center vrhunskih raziskav na omenjenih področjih. V okviru tega projekta bo lahko Univerza v Novi Gorici investirala približno 3.9 milijona evrov v izboljšanje raziskovalne infrastrukture, raziskovalni kader, izboljšanje organizacijske strukture, mednarodno sodelovanje ter sodelovanje z industrijskimi partnerji v regiji. Za strateško podporo izvajanj teh aktivnosti so v projekt vključeni štirje vrhunski mednarodni raziskovalni centri: Imperial College London, sinhrotron Elettra iz Trsta, École Polytechnique Fédérale de Laussane iz Švice in Delft University of Technology iz Nizozemske. Končni namen izvajanje tega projekta je, da raziskovalne skupine Univerze v Novi Gorici dosežejo polni raziskovalni in inovativni potencial, se celovito integrirajo v evropski raziskovalni prostor ter postanejo eden od evropskih vodilnih partnerjev pri razvoju

novih okoljskih tehnologij in materialov.

10. Pomen raziskovalnih rezultatov projektne skupine⁹

10.1. Pomen za razvoj znanosti¹⁰

SLO

Znanstveni in tehnološki cilji projekta so predstavljali velik izziv. Multiferroiki danes predstavljajo zelo obetajočo skupino materialov, ki je industrijsko uporabna v v prihodnjih sodobnih elektronskih sistemih povezanih predvsem z informacijsko in telekomunikacijsko tehnologijo. Projekt je bil namenjen pridobivanju novih osnovnih spoznanj in tako se pričakuje dolgoročen vpliv na to znanstveno področje.

Število poznanih enofaznih multiferroičnih spojin je še vedno majhno, med njimi pa je samo nekaj spojin, ki izkazujejo magnetoelektrično sklopitve pri sobni temperaturi. Pojavljajo pa se tudi problemi povezani z drugimi funkcionalnimi lastnostmi teh spojin, kot so povečana prevodnost ali visoke dielektrične izgube. To omejuje praktično uporabo teh materialov. Čeprav so raziskave multiferroikov zelo intenzivne ostajajo večinoma v domeni fizikov. Le nekaj raziskovalnih skupin se osredotoča na raziskave kemijskih vidikov te skupine materialov. Zaradi tega ostaja še veliko faznih sistemov popolnoma neraziskanih. Ravno tu pa smo mi našli našo raziskovalno nišo, v kateri smo sistematično raziskati nove fazne sisteme in razvili zelo zanimive multiferroične materiale.

Razultati tega projekta bodo imeli največji vpliv na raziskovalce, ki se intenzivno ukvarjajo s študijem fizikalnih mehanizmov multiferroičnih spojin, optimizacijo magnetoelektrične sklopitve in razvojem magneoelektričnih naprav. Poleg tega so študenti, ki so bili vključeni v ta projekt, dobili podroben vpogled v kemijo trdega stanja prehodnih elementov, tehnike procesiranja in fizikalne lastnosti trdnin.

ANG

The scientific and technological objectives of the proposed research project have been highly challenging. The field of multiferroics represents a very promising group of materials that can be exploited by industry in novel future electronic systems mainly for information and telecommunication technology. The project has been oriented towards producing new fundamental knowledge and long-term impact for scientific community.

The number of known single phase multiferroic compounds is still small, and among them only few exhibit the magnetoelectric behaviour at room temperature. In addition, the problems related to other functional properties, such as increased conductivity or high dielectric losses, impose a further limitation for their application. Although the research on multiferroics is very intensive it mainly remains within a domain of physics. Not many research groups are focused in the chemical aspect of this field. Therefore, many compositional fields, where new multiferroic compounds can be expected, remain unexplored. And exactly this is a research niche, where we want to systematically explore these phase fields in order to discover new better multiferroics.

The main beneficiaries of our research will be community of researchers, which are intensively engaged into the studies of physical mechanisms of multiferroic compounds, optimization of magnetoelectric coupling and design of magnetoelectric devices. In addition, the students working on this project will get a deep understanding of the solid-state chemistry of transition metals, processing techniques and physical properties of solids.

10.2. Pomen za razvoj Slovenije¹¹

SLO

Novo in izboljšane sodobne multifunkcijske materiale na osnovi magnetoelektrične sklopitve

lahko uspešno uporabimo na področju senzorske tehnologije, spominskih elementov in naprav, telekomunikacijskih komponent itd. Rezultati pridobljeni, v tem projektu, lahko omogočijo bistveno izboljšanje tehničnih lastnosti teh elektronskih naprav. Na primer, za povečanje gostote magnetnega zapisa se iščejo načini, ki bi omogočali manipulacijo z magnetnimi domenami na drugačen način kot danes, ko uporabljamo za to magnetno polje. Multiferoiki bi omogočili ravno to, pisanje in branje magnetnega zapisa z električnim poljem.

Konkurenco v elektronski industriji, predvsem na tehnološko manj zahtevnih področjih, dvigujejo nizkocenovni proizvajalci iz Daljnega Vzhoda. Njihova primerjalna prednost je predvsem poceni delovna sila. Na področju visokotehnoloških proizvodov evropski proizvajalci delujejo predvsem v dokaj zaščitenih tržnih nišah. To pa se lahko bistveno spremenimo, če izpolnimo pričakovanja glede lastnosti novih multifunkcijskih naprav. Zaradi fundamentalno drugačnih principov delovanja bodo funkcionalne lastnosti takšnih naprav superiorne v primerjavi z današnjimi sistemi. To bo odprlo možnost za slovensko industrijo, da začne masovno izdelovati elektronske naprave nove generacije z izredno visoko dodano vrednostjo.

Novi sodobni funkcionalni materiali bodo potencialno uporabni v različnih napravah, ki izboljšujejo kvaliteto življenja, zdravje in varnost prebivalcev. To so aplikacije iz informacijskih in telekomunikacijskih tehnologij, distribucije električne energije, varnost v transportu (magnetni kompas, magnetni senzorji, preklopni senzorji), avtomobilske industrije (nadzor gibajočih delov, nadzor prometa in vozila, nadzor vrtenja koles in prestavnega sistema itd) ter tudi iz bio-medicinskega področja. Na primer, v medicini lahko integrirane naprave z zelo občutljivimi magnetnimi senzorji vgradimo v pacientovo telo, kar je lahko izredno koristno za diagnosticiranje in zaznavanje procesov v telesu.

Projekt ima visokotehnološki karakter in kasnejša proizvodnja elektronskih naprav na osnovi teh materialov bo zahtevala sodelovanje visoko izobraženih specialistov. To bo povečalo potrebe po izobraževanju, praktičnem usposabljanju in specializaciji v inženirskih poklicih in s tem prispevalo k višjem življenjskem standardu.

Čeprav je bil projekt osredotočen na kemijo multiferoikov je zahteval zelo interdisciplinaren pristop. Projekt je zahteval sodelovanje kemikov, fizikov in inženirjev s področja materialov in elektronike ter izkušnje in poznavanje sofisticiranih analiznih tehnik in računalniškega modeliranja. opazen je bil precejšen posreden družben vpliv preko vključevanja tujih vrhunskih znanstvenikov in mednarodnih raziskovalnih laboratorijev v te raziskave, preko znanstvenih in strokovnih publikacij, ki prispevajo k podobi razvite visokotehnološke družbe, preko povečanega zanimanja za znanost in tehnologijo, interakcije med mladimi raziskovalci in njihovimi mednarodnimi vrstniki, pridobivanju profesionalnih izkušenj in znanj na relevantnih področjih znanosti...

ANG

The new and improved advanced multifunctional materials based on magnetoelectric coupling have an application potential in the markets of sensors, memory devices, telecommunications components, etc. The results, obtained during the fundamental studies of the these multifunctional materials will allow us to significantly improve technical characteristics of electronic devices. For instance, in the quest for ever-higher data densities, the manipulation of magnetic domains by means other than a magnetic field is of high technological interest. The multiferroics would offer a possibility of setting or reading a magnetic state by means of a coexisting ferroelectric state.

Competition in electronic industry is already tough at the less-sophisticated end of the market, in particular from low-cost producers in the Far East, because it functions largely on price. At the more expensive end of the market the European producers tend to operate in relatively protected niches. All this can be dramatically changed if the expectations related to the performance of multiferroic devices will be fulfilled. Because of the fundamentally different principles of the devices based on magnetoelectric components it is expected that by applying them in modern electronic systems they can be changed in a way that their functional efficiency will be highly superior in comparison with today's systems. This would open up a possibility for

Slovenian industry to mass produce the new-generation devices with a very high added value, which would certainly contribute to the European economy.

The new advanced functional multiferroic materials will be potentially used in different devices that improve the quality of life, health and safety of the citizens. These applications range from the traditional applications such as information and telecommunication technologies, electric energy distribution and safety in transport (magnetic compass, magnetic sensing, on/off sensor), automotive sector (control of moving parts, control of vehicles and traffic, gear-wheel rotation direction, etc.) to life sciences. In medicine, for instance, the applications of a very sensitive and integrated magnetic sensor that can be implanted in a patient are very attractive for diagnostics and sensing of processes in a body.

Carrying a high-tech character, the proposed research and possible future production of developed electronic devices based on these materials will require highly skilled specialists. This will raise the demands on education, training, and specialization in engineering and will contribute to a higher standard of living.

The project has been focused on chemistry of multiferroic compounds it requires a highly interdisciplinary approach. It has required involvement of chemists, physicists and engineers from field of material science and electronics. In addition, an expertise in sophisticated analytical techniques and computational modeling has be involved. We have observed a significant indirect societal impact of our research in the terms of involvement with highly respected international research partners, scientific and technical publications, which contribute to the positive image of a developed, high-tech country, increased scientific and technological awareness, possibility for the interaction between our young researchers and their international partners, gaining expertise, skills and knowledge form the relevant fields of science...

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

Cilj		
F.01	Pridobitev novih praktičnih znanj, informacij in veščin	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.02	Pridobitev novih znanstvenih spoznanj	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.03	Večja usposobljenost raziskovalno-razvojnega osebja	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.04	Dvig tehnološke ravni	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>

	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.05	Sposobnost za začetek novega tehnološkega razvoja	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.06	Razvoj novega izdelka	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.07	Izboljšanje obstoječega izdelka	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.08	Razvoj in izdelava prototipa	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.09	Razvoj novega tehnološkega procesa oz. tehnologije	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.10	Izboljšanje obstoječega tehnološkega procesa oz. tehnologije	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.11	Razvoj nove storitve	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.12	Izboljšanje obstoječe storitve	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.13	Razvoj novih proizvodnih metod in instrumentov oz. proizvodnih procesov	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE

	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.14	Izboljšanje obstoječih proizvodnih metod in instrumentov oz. proizvodnih procesov	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.15	Razvoj novega informacijskega sistema/podatkovnih baz	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.16	Izboljšanje obstoječega informacijskega sistema/podatkovnih baz	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.17	Prenos obstoječih tehnologij, znanj, metod in postopkov v prakso	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.18	Posredovanje novih znanj neposrednim uporabnikom (seminarji, forumi, konference)	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.19	Znanje, ki vodi k ustanovitvi novega podjetja ("spin off")	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.20	Ustanovitev novega podjetja ("spin off")	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.21	Razvoj novih zdravstvenih/diagnostičnih metod/postopkov	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>

F.22	Izboljšanje obstoječih zdravstvenih/diagnostičnih metod/postopkov	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.23	Razvoj novih sistemskih, normativnih, programskih in metodoloških rešitev	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.24	Izboljšanje obstoječih sistemskih, normativnih, programskih in metodoloških rešitev	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.25	Razvoj novih organizacijskih in upravljavskih rešitev	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.26	Izboljšanje obstoječih organizacijskih in upravljavskih rešitev	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.27	Prispevek k ohranjanju/varovanje naravne in kulturne dediščine	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.28	Priprava/organizacija razstave	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.29	Prispevek k razvoju nacionalne kulturne identitete	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.30	Strokovna ocena stanja	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>

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

Komentar

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

	Vpliv	Ni vpliva	Majhen vpliv	Srednji vpliv	Velik vpliv	
G.01	Razvoj visokošolskega 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="text"/>	<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"/>	
	Zmanjšanje porabe materialov in					

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					
G.06.	Varovanje okolja in trajnostni razvoj					
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					
G.09.	Drugo:					

Komentar

--

13.Pomen raziskovanja za sofinancerje¹²

--	--

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

14. Izjemni dosežek v letu 2012¹³

14.1. Izjemni znanstveni dosežek

SrTiO₃ velja za enega od najbolj kvantnih paraelektrikov, ki mu je mogoče z dopiranjem inducirati feroelektrično stanje. Mi smo posebno pozornost namenili vplivu dopiranja z paramagnetnima ionoma Mn²⁺ in Mn⁴⁺ na magnetne lastnosti, pri čemer smo natančno raziskovali mehanizem vgrajevanja Mn. Posledično smo prišlo do presentljivih spoznanj o vplivu procesnih parametrov na te atomistične mehanizme vgrajevanja ter o odsotnosti magnetizacije v primeru idealnega vgrajevanja dopanta. To zavrača dosedaj znane teorije o lokalnih poljih v tem materialu zaradi česa je to naše delo bilo deležno velikega odmeva in sprejeto v objavo v tak zelo odmevni reviji kot je Advanced Functional Materials

14.2. Izjemni družbeno-ekonomski dosežek

--

C. IZJAVE

Podpisani izjavljam/o, da:

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

Podpisi:

*zastopnik oz. pooblaščen oseba
raziskovalne organizacije:*

in

vodja raziskovalnega projekta:

Univerza v Novi Gorici

Matjaž Valant

ŽIG

Kraj in datum: Nova Gorica 4.3.2013

Oznaka prijave: ARRS-RPROJ-ZP-2013/114

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

² Napišite povzetek raziskovalnega projekta (največ 3.000 znakov v slovenskem in angleškem jeziku) [Nazaj](#)

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

⁴ Realizacija raziskovalne hipoteze. Največ 3.000 znakov vključno s presledki (približno pol strani, velikost 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, napišite obrazložitev. V primeru, da sprememb ni bilo, to navedite. Največ 6.000 znakov vključno s presledki (približno ena stran, velikost pisave 11). [Nazaj](#)

⁶ Navedite znanstvene dosežke, ki so nastali v okviru tega projekta. Raziskovalni dosežek iz obdobja izvajanja projekta (do oddaje zaključnega poročila) vpišete tako, da izpolnite COBISS kodo dosežka – sistem nato sam izpolni naslov objave, naziv, IF in srednjo vrednost revije, naziv FOS področja ter podatek, ali je dosežek uvrščen v A'' ali A'. [Nazaj](#)

⁷ Navedite družbeno-ekonomske dosežke, ki so nastali v okviru tega projekta. Družbeno-ekonomski rezultat iz obdobja izvajanja projekta (do oddaje zaključnega poročila) vpišete tako, da izpolnite COBISS kodo dosežka – sistem nato sam izpolni naslov objave, naziv, IF in srednjo vrednost revije, naziv FOS področja ter podatek, ali je dosežek uvrščen v A'' ali A'.

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

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

⁸ Navedite rezultate raziskovalnega projekta iz obdobja izvajanja projekta (do oddaje zaključnega poročila) v primeru, da katerega od rezultatov ni mogoče navesti v točkah 7 in 8 (npr. ker se ga v sistemu COBISS ne vodi). Največ 2.000 znakov, vključno s presledki. [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 / prepisite skladno z obrazcem "izjava sofinancerja" <http://www.arrs.gov.si/sl/progproj/rproj/gradivo/>, ki ga mora izpolniti sofinancer. Podpisan obrazec "Izjava sofinancerja" pridobi in hrani nosilna raziskovalna organizacija – izvajalka projekta. [Nazaj](#)

¹³ Navedite en izjemni znanstveni dosežek in/ali en izjemni družbeno-ekonomski dosežek raziskovalnega projekta v letu 2012 (največ 1000 znakov, vključno s presledki). Za dosežek pripravite diapozitiv, ki vsebuje sliko ali drugo slikovno gradivo v zvezi z izjemnim dosežkom (velikost pisave najmanj 16, približno pol strani) in opis izjemnega dosežka (velikost pisave 12, približno pol strani). Diapozitiv/-a priložite kot priložko/-i k temu poročilu. Vzorec diapozitiva je objavljen na spletni strani ARRS <http://www.arrs.gov.si/sl/gradivo/>, predstavitev dosežkov za pretekla leta pa so objavljena na spletni strani <http://www.arrs.gov.si/sl/analize/dosez/>. [Nazaj](#)

Obrazec: ARRS-RPROJ-ZP/2013 v1.00
09-1D-30-30-DB-85-EF-BD-6E-78-E4-F2-EC-6A-FA-4C-AE-87-5A-DC

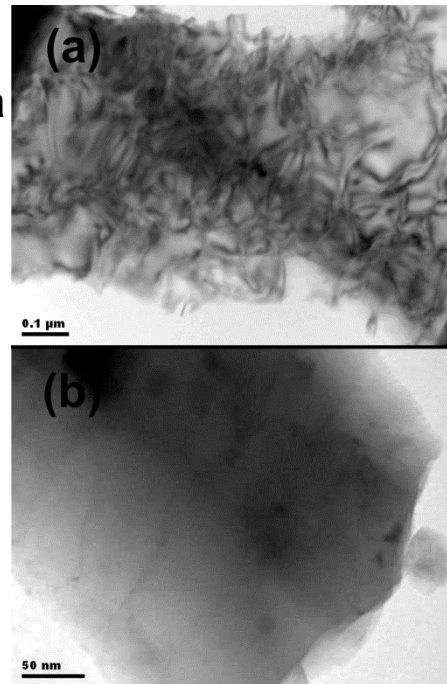
TEHNIKA

Področje: 2.04 – Materiali

Študij izvora magnetizma v SrTiO₃ dopiranem z Mn

Vir: M. Valant, T. Kolodiazhnyi, I. Arcon, F. Aguesse, A.-K. Axelsson, N.M. Alford
The Origin of Magnetism in Mn-Doped SrTiO₃, *Adv. Funct. Mater.*, **22**, 2114-2122
(2012).

Posnetki transmisijskega elektronskega mikroskopa SrTiO dopiranega s 3 at% Mn v skladu z nominalno sestavo (Sr_{1-x}Mn²⁺_x)TiO₃ in Sr(Ti_{1-y}Mn⁴⁺_y)O₃ po termični obdelavi na 1500°C / 10h. Slika kaže mrežo strukturnih defektov v vzorcu, ki izkazuje magnetne anomalije (nepravilno procesiran), in mnogo bolj urejeno strukturo za pravilno procesiran material



Na osnovi analize strukturnih in magnetnih lastnosti smo uspeli identificirati ekstrinzični izvor magnetizma v SrTiO₃ dopiranem z Mn. Ugotovili smo:

- substitucija Mn je selektivna in odvisno od pogojev lahko poteka na A- ali B-kristalografskem mestu.
- pravilno izvedena selektivna substitucija privedo do popolnoma enofaznega vzorca
- magnetne meritve so uvrgle možnost spinske sklopitve in pokazale na povsem paramagnetno obnašanje.
- magnetne anomalije so se pokazale izključno na vzorcih z Mn dopranem na ne predvideno kristalografsko mesto in v nepredvidenem valenčnem stanju
- takšne napake pri procesiranju vodijo do tvorbe strukturnih defektov na katerih se nukleirajo segregirajo magnetne zvrsti.