

Oznaka poročila: ARRS-RPROG-ZP-2015/27



ZAKLJUČNO POROČILO O REZULTATIH RAZISKOVALNEGA PROGRAMA

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

A. PODATKI O RAZISKOVALNEM PROGRAMU

1. Osnovni podatki o raziskovalnem programu

Šifra programa	P1-0045
Naslov programa	Anorganska kemija in tehnologija Inorganic Chemistry and Technology
Vodja programa	21556 Gašper Tavčar
Obseg raziskovalnih ur (vključno s povečanjem financiranja v letu 2014)	83640
Cenovni razred	
Trajanje programa	01.2009 - 12.2014
Izvajalci raziskovalnega programa (javne raziskovalne organizacije - JRO in/ali RO s koncesijo)	106 Institut "Jožef Stefan"
Raziskovalno področje po šifrantu ARRS	1 NARAVOSLOVJE 1.04 Kemija
Družbeno-ekonomski cilj	13.01 Naravoslovne vede - RiR financiran iz drugih virov (ne iz SUF)
Raziskovalno področje po šifrantu FOS	1 Naravoslovne vede 1.04 Kemija

B. REZULTATI IN DOSEŽKI RAZISKOVALNEGA PROGRAMA

2. Povzetek raziskovalnega programa¹

SLO

Program "Anorganska kemija in tehnologija" je vključeval tri raziskovalna področja.
a.) V sklopu sinteze anorganskih spojin smo pripravili vrsto

koordinacijskih spojin tipa $[M(L)_m](AF_6)_n$, v katerih so bili kot ligandi najpogostejše XeF_2 , HF , AsF_3 in tudi XeF_4 in KrF_2 . Raziskave novih anorganskih spojin smo razširili na uporabo fluorid-oksidnih Lewisovih kislin (npr. vanadijevi fluorid-oksidi). Reakcije XeF_2 in XeF_6 s fluoridi ter fluorid-oksidi elementov prehoda so vodile do nastanka bodisi aduktov tipa $XeF_2 \cdot MF_4$, $XeF_2 \cdot 4VOF_3$ oz. ionskih spojin. Posebno mesto zavzema priprava vrste spojin s perfluoridotitanatnimi(IV) anioni z alkalijskimi oz. različnimi organskimi kationi. Izpostaviti velja anion $[Ti_8F_{36}]^{4-}$, ki predstavlja doslej največji opaženi primer izolirane oligomerne enote ternarnih fluoridov s kovino v oksidacijskem stanju +4. Pripravili pa smo tudi vrsto spojin z dvojnimi anioni (npr. $M(BF_4)(AF_6)$) in spojine tipa $(H_3OMF(AsF_6)_2)$ ter koordinacijske spojine bakra(I). Raziskave smo razširili na kemijo silicija v nizkih oksidacijskih stanjih, kjer je silicij stabiliziran z velikimi organskimi elektrondonorskimi skupinami.

b. Na področje raziskav anorganskih materialov s posebnimi lastnostmi izpostavljamo raziskave kemije srebra, ki so še posebej zanimive zaradi poskusov priprave superprevodnih materialov. Magnetne meritve spojine $KAgF_3$ so pokazale nenavadno močno superizmenjalno antiferomagnetno interakcijo. Še posebej odmevna je bila priprava črnega $AgSO_4$, ki je ena redkih spojin kjer se $Ag(II)$ nahaja v nefluoridnem okolju. Sodelovali smo tudi pripravi materialov za uporabo v Li-ionskih baterijah (litijevi titanati, različni ogljikovi materiali). Na področju priprave zelo poroznih fluoridov smo nadaljevali raziskave možne direktne priprave fluoridnih aerogelov. Z nadkritičnim sušenjem fluoridnih solov oz. gelov v alkoholnih medijih smo tako kot prvi uspeli z direktno pripravo aerogelov na osnovi AlF_3 . Sodelovali smo pri pripravi oksidnih in sulfidnih nanomaterialov, primernih za katalizatorje.

c. S področja tehnoloških raziskav lahko izpostavimo sodelovanje na področju problematike živega srebra. Pri tem smo razvili nov pristop pri odstranjevanju elementarnega živega srebra iz dimnega plina v mokrem postopku razžvepljevanja. Na področju upravljanja s tveganji za večje nesreče z nevarnimi snovmi smo sodelovali pri raziskavah in pri svetovalnem delu za naročnike iz Slovenije (industrija, državni organi), ter v projektih EU. Na področju energetike sodelujemo pri dveh EU projektih: Adriacold in EMILIE. Z Razvojnim centrom Energija (RCE d.o.o) smo razvili sistem vpihovanja modelnega jamskega zraka s povišano koncentracijo CO_2 . Med raziskavami o vplivu fluora na človeka poudarjamo merjenje množine fluora v različnih vrstah čajev in iskanje rastlin, primernih za bioindikatorje spremljanja obremenjenosti okolja s fluorom.

ANG

The programme Inorganic Chemistry and Technology is composed of three main areas of research.

a. Synthesis of new inorganic compounds is the first area of research. New coordination compounds $[M(L)_m](AF_6)_n$, with ligands XeF_2 , HF , AsF_3 , XeF_4 and also KrF_2 were prepared. The research on the new inorganic compounds was successfully broadened to include the use of oxide fluoride Lewis acids. Adducts of the type $XeF_2 \cdot MF_4$, $XeF_2 \cdot 4VOF_3$ or ionic salts containing XeF_5^+ or $Xe_2F_{11}^+$ cations were obtained in reactions of XeF_2 or XeF_6 with transition-metal fluorides and oxide fluorides. Of particular significance is the preparation of various compounds containing perfluoridotitanate(IV) anions and alkali metal or organic cations. The $[Ti_8F_{36}]^{4-}$ is the largest known example of discrete oligomeric species found in fluoride compounds with the metal in the oxidation state four. Compounds with two different perfluorinated anions (e.g. $M(BF_4)(AF_6)$), oxonium salts $(H_3OMF(AsF_6)_2)$ and coordination compounds of copper(I) were synthesized. The research area

was extended to the chemistry of silicon in low oxidation states; the silicon is stabilized with large organic electron-donor groups.

b. Research in the area of inorganic materials with specific properties was also extensive. A study of silver chemistry has been made and is interesting because of the possible preparation of silver-based superconductors. The results of magnetic measurements show unusually strong, superexchange, antiferromagnetic interactions in KAgF_3 . Very notable was the preparation of black AgSO_4 , a rare example of a Ag(II) in a non-fluoride environment. New materials (based on lithium titanates, various carbon materials) for lithium-ion batteries were prepared. The search for a possible direct preparation of fluoride aerogels was continued. With the supercritical drying of fluoride sols or gels in alcoholic media we succeeded with the direct preparation of aerogels based on AlF_3 . The syntheses of oxide and sulphide nanomaterials for applications in catalysis were carried out.

c. Technological research for sustainable development was also successful. We wish to highlight the research in the field of mercury as a global pollutant. A new approach to the abatement technology for elementary Hg from flue gas was developed within the wet desulphurisation process. In the area of the risk management of major accidents involving hazardous substances we participated in research and consultation services for commissioners from Slovenia and from EU. In the energy field we cooperate in two EU projects: Adriacold and EMILIE. Together with RCE d.o.o. we developed a model mine-air (with increased CO_2 concentration) dispersion system. Among the research devoted to the estimation of fluorine's impact on humans, the research on the determination of the fluorine content in tea and the search for plants appropriate to act as bio-indicators to monitor the environmental load with fluorine should be highlighted.

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

SLO

Program "Anorganska kemija in tehnologija" je bil sestavljen iz raziskav na naslednjih področjih: a. sinteza novih anorganskih spojin, b. anorganski materiali s posebnimi lastnostmi in c. tehnološke raziskave za trajnostni razvoj. Podani so samo ključni rezultati posameznih področij.

a. Sinteza in karakterizacija novih koordinacijskih spojin tipa $[\text{M(L)}_m](\text{AF}_6)_n$ predstavlja eno od osnovnih področij programa V večini sintetiziranih spojin je XeF_2 vezan na kovinski center. Strukturna karakterizacija spojin pa je pokazala veliko raznolikost. Kationi se povezujejo preko XeF_2 molekul in/ali AF_6 enot v verige, plasti, dvojne plasti vse do zapletenih tro-dimenzionalnih struktur. Še posebej velja izpostaviti spojin $[\text{Cd}(\text{HF})_2(\text{XeF}_2)](\text{AF}_6)_2$ ($\text{A} = \text{Ta}, \text{Nb}$) in $[\text{Mg}(\text{XeF}_4)(\text{XeF}_2)](\text{AsF}_6)_2$. Slednja predstavlja prvi primer spojine s XeF_4 kot ligandom, vezanim na kovinski center. V sodelovanju z Univerzo McMaster, Kanada, smo uspeli pripraviti tudi prvo spojino s KrF_2 kot ligandom na kovinski center, $[\text{Mg}(\text{KrF}_2)_4](\text{AsF}_6)_2 \cdot 2\text{BrF}_5$. Raziskave novih anorganskih spojin smo razširili na uporabo fluorid-oksidnih Lewisovih kislin (npr. vanadijevi fluorid-oksidi) in uspešno pripravili spojine kot so $[\text{Ba}(\text{XeF}_2)](\text{V}_2\text{O}_2\text{F}_8)$, $\text{SeF}_3(\text{V}_2\text{O}_2\text{F}_7)$, itd.. Reakcije XeF_2 in XeF_6 s fluoridi ter fluorid-oksidi elementov prehoda so vodile do nastanka bodisi aduktov tipa $\text{XeF}_2 \cdot \text{MF}_4$, $\text{XeF}_2 \cdot 4\text{VOF}_3$ oz. ionskih spojin s kationi XeF^+ , Xe_2F_3^+ , XeF_5^+ in $\text{Xe}_2\text{F}_{11}^+$. S pomočjo Ramanske spektroskopije smo se osredotočili na razlago reakcijskih mehanizmov v reakcijah XeF_2 in TiF_4 , ki pogojujejo nastanek novega tipa Xe(II) -soli s polimernimi anioni: $[\text{XeF}]_2[\text{Ti}_9\text{F}_{38}]$ in $[\text{Xe}_2\text{F}_3][\text{Ti}_8\text{F}_{33}]$. Nastala eno- in dvodimenzionalna aniona, najdena v strukturah teh produktov, kažeta nepričakovano sposobnost vzdrževanja relativno visoko ioniziranih oblik XeF_2 ,

kar je bilo do sedaj mogoče le z uporabo najmočnejših Lewisovih kislin (npr. SbF_5). Posebno mesto zavzema priprava vrste spojin s perfluoridotitanatnimi(IV) anioni z alkalijskimi oz. različnimi organskimi kationi. Izpostaviti velja anion $[\text{Ti}_8\text{F}_{36}]^{4-}$, ki predstavlja doslej največji opaženi primer izolirane oligomerne enote ternarnih fluoridov s kovino v oksidacijskem stanju +4. Pri reakcijah med kovinskimi oksidi in Lewisovimi kislinami v superkislih medijih (brezvoden HF) prihaja do nastanka oksonijevih spojin. V kristalnih strukturah spojin $\text{H}_3\text{OMF}(\text{AsF}_6)_2$ ($\text{M} = \text{Fe}, \text{Cu}$) so prisotne cik-cak verige $[-\text{M}-\text{F}-\text{M}-]$ v katerih prihaja do močnih antiferomagnetnih interakcij. V preteklih letih smo uspeli pripraviti serijo spojin z dvema različnima fluoridnima anionoma $\text{M}(\text{BF}_4)(\text{AF}_6)$ ($\text{A} = \text{As}, \text{Sb}, \text{Bi}, \dots$) in v sodelovanju z Univerzo v Coloradu, ZDA, tudi $\text{K}_3(\text{AsF}_6)(\text{B}_{12}\text{F}_{12})$ in $\text{Cs}_3(\text{AsF}_6)(\text{B}_{12}\text{F}_{12})$. Na področju priprave bakrovih(I) kompleksov izpostavljamo primer sinteze $[\text{Cu}(\text{SCN})(\text{py})_2]_2\text{CO}_3$, v katerem pride do vezave CO_2 iz zraka. Tekom programa smo raziskave razširili na kemijo silicija v nizkih oksidacijskih stanjih, v katerih je silicij stabiliziran z velikimi organskimi elektron-donorskima skupinami. (sodelovanje z Univerzo v Göttingenu). Raziskave so potekale s tremi silileni RSi ($\text{R} = \text{CH}(\text{C}=\text{CH}_2)(\text{CMe})(2,6\text{-iPr}_2\text{C}_6\text{H}_3\text{N})_2$), RSiCl_2 ($\text{R} = 1,3\text{-bis}(2,6\text{-diizopropilfenil})\text{imidazol-2-ylidene}$) in RSiCl ($\text{R} = \text{PhCN}(t\text{Bu})_2$). V sodelovanju z Univerzo v Göttingenu smo preizkusili njihovo reaktivnost z reaktivnimi nenasičenimi spojinami ciklooktatetraen, benzoil piridin, diizopropil azodikarboksilat in 1,2 difenilhidrazin. V vseh naštetih primerih pride do tvorbe petčlenskega heterocikličnega obroča preko $[1 + 4]$ cikloadicije. Reakcije s karbodiimidom pa v nasprotju s pričakovanji vodijo do nastanka silaimina, medtem ko reakcija z izocianatom vodi do nastanka štiričlenskih Si_2O_2 obročev.

b. Sklop raziskav na področju anorganskih materialov je bil prav tako obsežen in raznolik. Raziskave kemije srebra, ki so še posebej zanimive zaradi poskusov priprave superprevodnih materialov, so potekale v sodelovanju z Univerzama v Varšavi in Ljubljani. Raziskali smo temperaturno odvisne strukturne in magnetne lastnosti KAgF_3 . Raziskave magnetnih lastnosti so pokazale, da deluje med sosednjimi srebrovimi(II) ioni v verigah znatna antiferomagnetna interakcija katere jakost je primerljiva z magnetno interakcijo v superprevodnikih na osnovi bakrovih(II) oksidov. S termičnim razkrojem $\text{NaAgF}_4/\text{NaF}$ zmesi je bil pripravljena zelo čista spojina Na_2AgF_4 . V kristalni strukturi so prisotne neskončne $[\text{AgF}_{2+4/2}]^{2-}$ verige z najkrajšimi znanimi neveznimi kontakti med srebrovimi kationi. Posledica tega pa so izredno močne antiferomagnetne interakcije znotraj $[\text{AgF}_{2+4/2}]^{2-}$ verig. Še posebej odmevna je bila priprava črnega AgSO_4 , ki je ena redkih spojin kjer se $\text{Ag}(\text{II})$ nahaja v nefluoridnem okolju. Z Aichi Institutom, Japonska smo sodelovali pri pripravi materialov za uporabo v Li-ionskih baterijah (litijevi titanati, različni ogljikovi materiali). Z uporabo fluoriranega fullerena $\text{C}_{60}\text{F}_{48}$ smo s partnerji iz tujine sodelovali pri raziskavah elektronskega dopiranja enoplastnega epitaksialnega grafena na podlagi SiC (nastane p-tip polprevodnika). Sodelovali smo tudi pri raziskavah površinskega dopiranja (s C_{60} in $\text{C}_{60}\text{F}_{48}$) diamantov, ki so na površini zaključeni z vodikovimi atomi. V primerjavi s čistim diamantom, ki je izolator, lahko z vodikom zaključeni diamanti postanejo p-tip polprevodnika kadar se na njihovo površino adsorbirajo molekule z veliko elektronsko afiniteto (npr. $\text{C}_{60}\text{F}_{48}$). Na področju priprave zelo poroznih fluoridov smo nadaljevali s preučevanjem možnosti direktne priprave fluoridnih aerogelov. Podrobneje smo raziskali nekatere glavne solvotermalne pogoje, ki vodijo do nastanka aerogelov na osnovi aluminijevega(III) fluorida, AlF_3 . Zelo odprte in voluminozne aerogelske strukture dobimo le v primerih, ko brezvodna topila vsebujejo metanol, sušenje prekursorjev v obliki solov oz. gelov pa poteka pri nadkritičnih pogojih. Tako smo kot prvi uspeli z direktno pripravo aerogelov na osnovi AlF_3 . Rezultati heterogenih reakcij trifluorometana z nekaterimi kovinskimi oksidi pri relativno nizkih temperaturah je bilo ugotovljeno, da na kislost

fluoriranih mešanih oksidov na osnovi $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3/\gamma\text{-Ga}_2\text{O}_3$ poleg stopnje fluoriranja odločilno vpliva delež galija. To lahko pripišemo preferenčni zamenjavi najbolj kislih površinskih Al^{3+} ionov z manj kislimi Ga^{3+} ioni. Zamenjava ionov v mešanih oksidih tako vodi do neproporcionalne tvorbe kislinskih centrov manjše jakosti. Z ustreznim Al/Ga razmerjem ter delnim fluoriranjem lahko na ta način pripravimo trdne materiale s prilagojeno kislostjo. Pomen teh raziskav ni zgolj v uspešni pripravi nove skupine t.i. »eksotičnih« aerogelov, ampak predvsem v možnosti priprave fluoridnih nanodelcev definiranih oblik in dimenzij. Fluoride s takimi značilnostmi ne moremo dobiti z uporabo običajnih sintetskih pristopov. Sodelovanje s centrom odličnosti Nanocenter, Odsekom kompleksne snovi (IJS) in Kemijskim inštitutom v Ljubljani je potekalo pri pripravi oksidnih in sulfidnih nanomaterialov, primernih za katalizatorje. Izkazalo se je, da izhodni material močno vpliva na obliko nanodelcev v produktu. Novi katalitski nanomateriali na osnovi sulfidov prehodnih elementov, so izredno učinkoviti v primeru hidrodeoksigenacijskih reakcij za proizvodnjo goriv in predstavljajo nizkocenovno alternativo katalizatorjem na osnovi plemenitih kovin. Z Nacionalno Akademijo znanosti Ukrajine smo sodelovali na področju priprave aktivnega ogljika z visoko specifično površino, ki je bil pripravljen iz koščic drenovih plodov, ostanka procesiranja hrane, s termično obdelavo. Tako pripravljeni materiali so primerni za čiščenje težkih kovin iz odpadnih vod in separacijo kovinskih ionov. V sklopu centra odličnosti Polimat smo raziskovali sintezo in lastnosti polimerov, pripravljenih v plazmi, ki bi bili primerni za uporabo v medicini.

c. Tehnološke raziskave za trajnostni razvoj so bile prav tako uspešne. Obsegale so različna področja in zahtevale sodelovanje ne samo znotraj skupin v Sloveniji, temveč tudi širše. Kot prve želimo izpostaviti raziskave na področju problematike živega srebra. Pri tem smo razvili nov pristop pri odstranjevanju elementarnega živega srebra iz dimnega plina v mokrem postopku razžvepljevanja, za katerega je doslej veljalo, da ni učinkovit, in uspeli povečati učinkovitost z analizo in prilagoditvijo kemizma absorpcijske suspenzije (sodelovanje z Odsekom znanosti o okolju, IJS). Na področju upravljanja s tveganji za večje nesreče z nevarnimi snovmi smo sodelovali pri raziskavah in pri svetovalnem delu za naročnike iz Slovenije (industrija, državni organi), ter EU (projekti 7. OP: iNTegRisk - Razvoj, implementacija in testiranje novih metod in orodij za upravljanje s tveganji; TOSCA - Popolno upravljanje operacij pri varnostno kritičnih dejavnostih; EDEN (kot zunanji svetovalci); COST akcija ES 1006). Omeniti velja še projekt CIVITAS ELAN (7. OP EU), kjer smo sodelovali kot ocenjevalci petih ukrepov, namenjenih izboljšanju kakovosti mobilnosti v mestnih središčih, izboljšanju kakovosti življenja in varnosti ter zdravja uporabnikov javnega in zasebnega prevoza. Na področju energetike sodelujemo pri dveh EU projektih: Adriacold in EMILIE. Pri projektu Adriacold so sodelavci programske skupine vodili delovni sklop »Monitoring and data mining«, kamor spada načrtovanje, sistematično zbiranje podatkov o učinkovitosti šestih pilotnih hladilnih naprav na sončno energijo (v mestih: Dubrovnik, Reka (Hrvaška), Piran (Slovenija), Bazovica, Rimini in Bari (Italija)) ter obdelavo podatkov z avtomatiziranim prikazom ključnih operativnih kazalnikov učinkovitosti v spletni aplikaciji. Podatki kažejo pomembne razlike med napravami, saj so tudi nameni rabe hladu različni (računski center, zdravilišče, vrtec). V okviru sodelovanja v EMILIE (Enhancing Mediterranean Initiatives Leading SMEs to Innovation in Building Energy Efficiency Technologies, www.emilieproject.eu) smo v letu 2014 na IJS izgradili pilotni objekt Infrason, ki je zasnovan kot raziskovalno-izobraževalni energijski poligon, temelječ na integraciji najmodnejših sončnih termalnih tehnologij v enovit sistem ogrevanja in hlajenja prostorov z energijo sonca ter prikazu uporabe 'sonca kot infrastrukture'. Sistem je bil zagnan julija 2014, ko so stekle tudi meritve, s katerimi se izvajajo podrobne analize procesnih in energetskih indikatorjev ter optimizacija sistema. V

pilotnem objektu preizkušamo sistemske rešitve ogrevanja in hlajenja, ki imajo vgrajene najnovejše solarne tehnologije in sisteme za rabo odpadne toplote ter izvajamo izobraževanja, ki so v prvi vrsti namenjena malim in srednje velikim podjetjem ter upravnim organom, ki skrbijo za spodbujanje energetske učinkovitosti in rabe obnovljivih virov energije. Eden od rezultatov uspešnega delovanja pilotnega objekta so tudi dogovori o nadaljevanju sodelovanja pri preskušanju in razvoju novih zasnov solarnih termalnih tehnologij. Z Razvojnim centrom Energija (RCE d.o.o) smo razvili sistem vpihovanja modelnega jamskega zraka s povišano koncentracijo CO₂, izvedli laboratorijske in pilotne poskuse ter dimenzionirali polindustrijsko napravo za odstranjevanje CO₂. Med raziskavami o vplivu fluora na človeka poudarjamo merjenje množine fluora v različnih vrstah čajev in iskanje rastlin, primernih za bioindikatorje spremljanja obremenjenosti okolja s fluorom. Dosedanji rezultati kažejo, da je navadna kopriva primerna za to nalogo.

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

SLO

Zastavljeni cilji programa P1-0045 » Anorganska kemija in tehnologija« so bili v celoti izpolnjeni. V nekaterih segmentih raziskav smo zastavljene cilje tudi presegli. V program smo v letu 2010 vključili zelo obetavne raziskave na področju silicija v nizkem oksidacijskem stanju. Začetne raziskave hibridnih materialov vsekakor predstavljajo pomemben temelj in jih nameravamo še nadaljevati in razvijati. Na uspešno izvedbo programa kažejo tudi številne publikacije, poglavja v knjigah, vabljena predavanja na simpozijih in drugi prispevki ter patenti in patentne prijave.

Kot nadgradnjo doseženih ciljev je potrebno poudariti tudi uspešnost članov programske skupine pri sodelovanju v novejših mednarodnih projektih s področij procesne varnosti (preprečevanja večjih nesreč) in tudi trajnostne energetike, kar programski skupini s tako široko usmerjenostjo odpira pot do razvoja novih področij. V obeh projektih s področja energetike raziskujemo in populariziramo uvajanje obnovljivih virov energije (v tem primeru sončne toplote) za namen hlajenja oz. osveževanja bivalnih prostorov, ter z uporabo sodobnih tehnik merjenja, komuniciranja, obdelave in analize podatkov izvajamo primerjalno analizo uvajanja različnih aplikacij tehnologije solarnega hlajenja v prakso.

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

SLO

Ni bilo sprememb.

6. Najpomembnejši znanstveni rezultati programske skupine⁵

Znanstveni dosežek			
1.	COBISS ID	22651943	Vir: COBISS.SI
	Naslov	XeF ₄ kot ligand kovinskega centra	
		XeF ₄ as a ligand for a metal ion	
	Opis	Z reakcijo med Mg(AsF₆)₂ in prebitnim XeF₄ v brezvodnem HF smo pripravili prvo spojino, [Mg(XeF₂)(XeF₄)](AsF₆)₂, v kateri nastopa XeF₄ kot ligand vezan na centralni kovinski ion. Rentgenska strukturna analiza je pokazala, da je na centralni kovinski atom poleg XeF₄ vezan tudi XeF₂. Predvidevamo, da je XeF₂ nastal z redukcijo XeF₄ med kristalizacijo. Ker je XeF₂ boljši ligand kot XeF₄, je bilo pričakovati, da se bo ves nastali XeF₂	

			vezal na centralni kovinski atom.
		ANG	In the reaction between $\text{Mg}(\text{AsF}_6)_2$ and an excess of XeF_4 in anhydrous HF the first compound with XeF_4 as a ligand on the central metal ion was isolated, $[\text{Mg}(\text{XeF}_2)(\text{XeF}_4)](\text{AsF}_6)_2$. X-ray structural analyses have shown that there are two ligands, XeF_2 and XeF_4 , bound to the central metal ion. It is assumed that the XeF_2 was obtained by the reduction of XeF_4 during the process of crystallization. Since XeF_2 is a much better ligand than XeF_4 , it is expected that all the formed XeF_2 will be bound to the central metal ion.
	Objavljeno v		Wiley-VCH; Angewandte Chemie; 2009; Vol. 48, no. 8; str. 1432-1434; Impact Factor: 11.829; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.488; A'': 1; A': 1; WoS: DY; Avtorji / Authors: Tavčar Gašper, Žemva Boris
	Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek
2.	COBISS ID		23410215
	Vir: COBISS.SI		
	Naslov	SLO	$\text{Ag}(\text{II})\text{SO}_4$: pristen sulfat dvovalentnega srebra z izjemno močnimi enodimenzionalnimi antiiferomagnetnimi interakcijami.
		ANG	$\text{Ag}(\text{II})\text{SO}_4$: A genuine sulfate of divalent silver with anomalously strong, one-dimensional, antiferromagnetic interactions
	Opis	SLO	Črn AgSO_4 se lahko pripravi z metatetično reakcijo med $\text{Ag}(\text{SbF}_6)_2$ in K_2SO_4 v brezvodnem HF ali z reakcijo med AgF_2 in H_2SO_4 . Glede na rezultate termične analize, je spojina metastabilna in pri temperaturi nad 120 °C začne razpadati, pri čemer odpušča O_2 . Spojina kristalizira v triklnskem kristalnem sistemu. Kristalno strukturo sestavljajo planarne pravokotne enote AgO_4 , ki so preko SO_4 tetraedrov povezane v tridimenzionalno mrežo. Meritve magnetne susceptibilnosti v odvisnosti od temperature so pokazale prisotnost močnih antiiferomagnetnih interakcij med sosednjimi Ag^{2+} kationi.
		ANG	Black AgSO_4 could be prepared by the methathetic reaction of $\text{Ag}(\text{SbF}_6)_2$ and K_2SO_4 in anhydrous HF or by the reaction of AgF_2 with H_2SO_4 . According to thermoanalytical studies, the product is metastable and decomposes above 120 °C with the evolution of O_2 . The triclinic crystal structure of AgSO_4 contains planar, rectangular AgO_4 units that are connected by SO_4 tetrahedra to form a three-dimensional network. Measurements of the temperature-dependent magnetic susceptibility indicate that there are strong antiferromagnetic interactions between the neighbouring Ag^{2+} cations.
	Objavljeno v		Wiley-VCH; Angewandte Chemie; 2010; Vol. 49, no. 9; str. 1683-1686; Impact Factor: 12.730; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.761; A'': 1; A': 1; WoS: DY; Avtorji / Authors: Malinowski Przemysław, Derzsi Mariana, Mazej Zoran, Jagličić Zvonko, Gaweł Bartłomiej, Łasocha Wiesław, Grochala Wojciech
	Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek
3.	COBISS ID		23814695
	Vir: COBISS.SI		
	Naslov	SLO	Selektivna aktivacija aromatskih C-F in C-H vezi s silileni z različno koordiniranim silicijem
		ANG	Selective aromatic C-F and C-H bond activation with silylenes of different coordinate silicon
	Opis	SLO	Reakcije med silileni in različnimi fluoriranimi aromatskimi spojinami so se pokazale za stereospecifične. Podobni mehanizmi so do sedaj praktično neznani, produkti pa so potencialno zanimive izhodne spojine za prenos fluoriranih skupin na organske substrate.
			Reactions between silylenes and fluorinated aromatic compounds were

		ANG	shown to be stereospecific. Similar mechanisms are almost unknown in organometallic chemistry. The products can be used as starting materials for the transfer of different fluorinated groups to organic substrates.
	Objavljeno v		American Chemical Society; Journal of the American Chemical Society; 2010; Vol. 132, no. 29; str. 10164-10170; Impact Factor: 9.019; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.761; A'': 1; A': 1; WoS: DY; Avtorji / Authors: Anukul Jana, Prinson Samuel P., Tavčar Gašper, Roesky Herbert W., Schulzke Carola
	Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek
4.	COBISS ID		26583079 Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Kubični [Ti8F36]4- anion v kristalnih strukturah K4Ti8F36.8HF in Rb4Ti8F36.6HF
		ANG	The cubic [Ti8F36]4- anion found in the crystal structures of K4Ti8F36. 8HF and Rb4Ti8F36. 6HF
	Opis	SLO	V sklopu raziskav reakcij med alkalijskimi fluoridi in TiF4 smo uspeli pripraviti kristale spojin K4Ti8F36·8HF in Rb4Ti8F36·6HF ter določiti njuno kristalno strukturo. V obeh strukturah so prisotni prej neznani izolirani oktamerni anioni [Ti8F36]4-. Vsak izmed njih je zgrajen iz osmih oktaedrov TiF6, ki so preko skupnih oglišč povezani v kocko. Oktamerni anioni [Ti8F36]4- so doslej največji opaženi primer izolirane oligomerne enote v ternarnih fluoridih s kovino v oksidacijskem stanju +4.
		ANG	During the investigation of reactions between alkaline metal fluorides and titanium tetrafluoride, single crystals of K4Ti8F36·8HF and Rb4Ti8F36·6HF were prepared and their crystal structures determined. Both the structures contain previously unknown, discrete, octameric [Ti8F36]4- anions. Each of them is constructed from eight TiF6 octahedral units, sharing joint vertices and connected in that way into a cube. The herein reported [Ti8F36]4- anion represents the largest known example of discrete oligomeric species found in fluoride compounds with the metal in the oxidation state four.
	Objavljeno v		Royal Society of Chemistry; Chemical communications; 2013; Vol. 49, no. 26; str. 2703-2705; Impact Factor: 6.718; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 3.395; A': 1; WoS: DY; Avtorji / Authors: Shlyapnikov Igor, Goreshnik Evgeny A., Mazej Zoran
	Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek
5.	COBISS ID		28315943 Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Ksenonovi(II) polifluoridotitanati(IV)
		ANG	Xenon(II) polyfluoridotitanates(IV)
	Opis	SLO	V prispevku so predstavljeni rezultati raziskav termičnih reakcij med srednje močno Lewisovo bazo ksenonovim difluoridom (XeF2) in titanovim tetrafluoridom (TiF4). S pomočjo Ramanske spektroskopije smo se osredotočili predvsem na razlago reakcijskih mehanizmov, ki pogojujejo nastanek novega tipa Xe(II)-soli s polimernimi anioni: [XeF]2[Ti9F38] in [Xe2F3][Ti8F33]. Nastala eno- in dvodimenzionalna aniona, najdena v strukturah teh produktov, kažeta nepričakovano sposobnost vzdrževanja relativno visoko ioniziranih oblik XeF2, kar je bilo do sedaj mogoče le z uporabo najmočnejših Lewisovih kislin (npr. SbF5). Uporabljen sintezni način in metoda kristalizacije pa odpirata tudi nove možnosti za tvorbo termodinamsko zelo obstojnih spojin XeF+ in Xe2F3+ z anioni drugih, šibkejših Lewisovih kislin.
			Research of the thermal reactions between a medium-strong Lewis base xenon difluoride (XeF2) and titanium tetrafluoride (TiF4) were described. Using Raman spectroscopy, we focused our investigations on clarifying the

	ANG	complex reaction mechanisms, which lie behind the formation of a new type of Xe(II) salts with polymeric anions: $[\text{XeF}]_2[\text{Ti}_9\text{F}_{38}]$ and $[\text{Xe}_2\text{F}_3][\text{Ti}_8\text{F}_{33}]$. The 1-D and 2-D polyanions found in the structures of these compounds show an unexpected ability of maintaining relatively high ionization forms of XeF_2 . To date, this process was accomplished only by using the strongest known Lewis acids (e.g. SbF_5). The synthetic and crystallization methods developed open new possibilities in terms of making more thermodynamically stable XeF^+ in Xe_2F_3^+ salts, containing other anions of weaker Lewis acids.
Objavljeno v		Wiley-VCH; Angewandte Chemie; 2014; Vol. 53, no. 50; str. 13713-13719; Impact Factor: 11.336; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 3.395; A'': 1; A': 1; WoS: DY; Avtorji / Authors: Radan Kristian, Goreshnik Evgeny A., Žemva Boris
Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek

7. Najpomembnejši družbeno-ekonomski rezultati programske skupine⁶

	Družbeno-ekonomski dosežek		
1.	COBISS ID	28368423	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	InfraSUN
		ANG	InfraSUN
	Opis	SLO	Tehnologija sončnega ogrevanja in hlajenja bi lahko v prihodnosti igrala pomembno vlogo, še posebej, ker je združljiva z večino konvencionalnih načinov ogrevanja, nudi pa tudi visoko učinkovitost, še posebej, ko je vključena v sistemih daljinskega ogrevanja. InfraSUN pilotna naprava temelji na uvedbi solarnega ogrevanja in hlajenja ter prikazu modelov za njeno uvedbo v smislu "sonca kot infrastrukture". Kombinacija različnih sončnih (toplotnih) tehnologij se je uporabljala za oceno, prikaz in promocijo koncepta novega infrastrukturnega gospodarskega modela, ki bi omogočal večjo rabo sončne energije in zmanjšanje stroškov energije za končne uporabnike v storitvenem (terciarnem) sektorju.
		ANG	Solar heating and cooling technologies could play an important role particularly as they are compatible with majority of conventional heat sources and offer high efficiency when combined into district heating system. InfraSUN pilot plant is based on elaboration of models of infrastructural solar heating and cooling. A combination of various solar thermal technologies were used to evaluate, demonstrate and promote a concept of a new infrastructural economic model to facilitate the use of solar energy and to cut down expenses for the end users in tertiary sector.
	Šifra	F.08	Razvoj in izdelava prototipa
	Objavljeno v	Menea; Tromba; 2014; Avtorji / Authors: Tavčar Gašper, Čičman Jure	
	Tipologija	1.22	Intervju
2.	COBISS ID	251525120	Vir: vpis v poročilo
	Naslov	SLO	Organizacija 16. evropskega simpozija o kemiji fluora, Ljubljana, 18. – 23. 7. 2010 (16th European Symposium on Fluorine Chemistry; 16th ESFC).
		ANG	Organization of the 16th European Symposium on Fluorine Chemistry; 16th ESFC in Ljubljana, July 18–23, 2010.
			ESFC srečanja potekajo v Evropi vsaka tri leta in so, poleg sorodnih mednarodnih simpozijev o kemiji fluora, najpomembnejša mednarodna srečanja na tem področju kemije. ESFC srečanja so tako zanimiva za raziskovalce z univerz, institutov in iz industrije. Srečanja se je udeležilo

	Opis	SLO	333 udeležencev. Mednarodni ugled programske skupine in pomen njenih dosežkov se, poleg ostalega, odraža tudi v tem, da nam je mednarodna strokovna skupnost zaupala organizacijo tako prestižnega dogodka. Pri organizaciji 16. ESFC so sodelovali naslednji člani programske skupine: T. Skapin (predsednik), M. Tramšek (sopredsednica) in B. Žemva (častni predsednik in predsednik znanstvenega odbora); člani organizacijskega odbora so bili: A. Koblar, R. Moravec, T. Oblak in G. Tavčar.	
		ANG	ESFC symposia are organized every three years and are, besides the International Symposia on Fluorine Chemistry (ISFC), the most important meetings of the international fluorine community. The symposium was interesting for researchers from universities, institutes and industry. There were 333 participants at the symposium. The international reputation of the program group and its achievements were reflected in the fact that the international research community entrusted us with the organization of such a prestigious event The following members of the program group participated in the organization of the event: T. Skapin (Chairman), M. Tramšek (Co-chair), B. Žemva (Honorary chairman and Chairman of the Scientific Advisory Board) and A. Koblar, R. Moravec, T. Oblak, G. Tavčar (members of the Organizing committee).	
	Šifra	B.01 Organizator znanstvenega srečanja		
	Objavljeno v	16th European Symposium on Fluorine Chemistry - ESFC, July 18-23, 2010, Ljubljana, Slovenia, SKAPIN, Tomaž (urednik). [Book of abstracts]. Ljubljana: Jožef Stefan Institute, 2010. 368 str., ilustr. ISBN 978-961-264-020-0. [COBISS.SI-ID 251525120]		
	Tipologija	4.00 Sekundarno avtorstvo		
3.	COBISS ID	26994215	Vir: COBISS.SI	
	Naslov	SLO	Predgovor; posebna številka revije Acta Chimica Slovenica posvečena prof. dr. Borisu Žemvi	
		ANG	Preface; Memorial Issue; Acta Chimica Slovenica dedicated to Prof. Boris Žemva	
	Opis	SLO	B. Žemva je leta 2011 prejel Zoisovo nagrado za življensko delo na področju anorganske kemije fluora. Med glavnimi poudarki v obrazložitvi nagrade so dosežki na področju kemije žlahtnih plinov in visokoenergijskih oksidantov ter koordinacijskih spojin z neobičajnimi ligandi, s katerimi se je povzpel v izbrano peščico raziskovalcev v svetovnem vrhu, ki so premaknili znanje na omenjenih področjih na raven, ki je bila pred štiridesetimi leti še nepredstavljiva. Ob tej priložnosti mu je bila posvečene tretja številka revije Acta Chimica Slovenica v letu 2013. V reviji je štirinajst prispevkov s področja kemije fluora, ki so jih prispevali sodelavci in kolegi iz slovenskih skupin kot tudi skupine iz Japonske, Ukrajine, Poljske, Nemčije, Francije in ZDA.	
		ANG	In 2011, B. Žemva received the highest scientific award in Slovenia, the Zois Award for lifetime achievements, for his outstanding work in the field of inorganic fluorine chemistry. From the official written statement of the award, one part can be highlighted: "Prof. Dr. Boris Žemva belongs, with his research achievements in the field of inorganic fluorine chemistry – especially the chemistry of noble gases, high-energy oxidizers and coordination compounds with unusual ligands – among the few researchers in the world who have really advanced the knowledge in these areas over the past forty years to an unprecedented extent." The third issue of Acta Chimica Slovenica in 2013 was dedicated to him. Fourteen contributions from the research area of fluorine chemistry were submitted by his co-workers and colleagues from Slovenia together with	

		those from Japan, Ukraine, Poland, Germany, France and the USA.
	Šifra	E.01 Domače nagrade
	Objavljeno v	Slovensko kemijsko društvo =Slovenian Chemical Society; Acta chimica slovenica; 2013; Vol. 60, no. 3; 2 str.; Impact Factor: 0.810;Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 3.395; WoS: DY; Avtorji / Authors: Tramšek Melita, Malič Barbara
	Tipologija	1.20 Predgovor, spremna beseda
4.	COBISS ID	26542887 Vir: COBISS.SI
	Naslov	<i>SLO</i> Odstranjevanje Hg0 iz dimnih plinov pri mokrem postopku RDP z oksidacijo z zrakom: prispevek k razvoju modela kemijskega procesa
		<i>ANG</i> Removal of Hg0 in wet FGD by catalytic oxidation with air - A contribution to the development of a process chemical model
	Opis	<i>SLO</i> Eksperimentalna in teoretična določitev kemijskih mehanizmov oksidacije elementarnega Hg pod pogoji mokrega procesa razžvepljevanja dimnih plinov (RDP) s kisikom; s prilagoditvijo kemije procesa RDP je preprečena redukcija oksidirane Hg(II), zato se živo srebro zadrži v procesni raztopini. Prepoznane so bile najpomembnejše reakcije in ravnotežja kompleksov. Oksidacijo katalizira prisotnost nekaterih prehodnih elementov, npr. Fe in Mn, ki v kombinaciji zagotovita celo sinergijski učinek. Oksidirano obliko Hg pa stabilizirajo prisotni sulfatni, sulfitni, karbonatni, hidroksidni in kloridni anioni kot ligandi v kompleksih. Pri odstranitvi Hg iz raztopine igra vlogo Hg22+, kar s premikom ravnotežja še izboljša učinek odstranjevanja Hg iz dimnega plina, izmerjene vrednosti znašajo od 70% do preko 95%.
		<i>ANG</i> An experimental and theoretical determination of the chemical mechanisms of elemental Hg oxidation within the wet flue gas desulphurisation (FGD) process with oxygen; by the modification of the FGD chemistry the reduction of oxidised Hg(II) is prevented and mercury is retained in the FGD process solution. The oxidation is catalysed by transition elements present in the solution, like Fe and Mn, which in combination provide a synergistic effect. Oxidised mercury is stabilized by the sulphate (IV), sulphate (VI), carbonate, hydroxide and chloride anions as ligands in complexes. The formation of Hg22+ plays a role in the removal of Hg to insoluble species, which by shifting the equilibrium enhances the removal efficiency, which was measured to be from 70% to over 95%.
	Šifra	F.10 Izboljšanje obstoječega tehnološkega procesa oz. tehnologije
	Objavljeno v	Elsevier; Fuel; 2013; Vol. 107; str. 183-191; Impact Factor: 3.406;Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 1.798; A': 1; WoS: ID, II; Avtorji / Authors: Stergaršek Andrej, Horvat Milena, Frkal Peter, Ribeiro Guevara Sergio, Kocjančič Robert
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek
5.	COBISS ID	27565095 Vir: COBISS.SI
	Naslov	<i>SLO</i> Metode za sintezo kvazi eni dimenzionalnih struktur 4d in 5d prehodnih kovin (Nb, Mo, Ta, W)
		<i>ANG</i> Method for a synthesis of quasi one-dimensional structures of 4D and 5 D (Nb, Mo, Ta, W) transition metals
	Opis	<i>SLO</i> S skupnim delom programske skupine, Odseka za kompleksne snovi (IJS) in Nanocentra je bil razvit postopek priprave enodimenzionalnih struktur 4d in 5d prehodnih kovin (Nb, Mo, Ta, W) v obliki kvazi enodimenzionalnih struktur. Enodimenzionalne kovinske strukture so zaradi dobre prevodnosti in stabilnosti primerne za uporabo v nanoelektroniki kot povezava med elektronskimi elementi nano dimenzij. Kovinske enodimenzionalne strukture so pomembne tudi zaradi možnosti uporabe kot izhodni material

		za sinteze sulfidov ali nitridov v obliki nanostruktur. S tem se potencialna uporaba teh materialov razširi tudi na področje heterogene katalize.
	ANG	The cooperation between our research group, the Department of Complex Matter (JSI) and the Nanocenter resulted in the development of a process for the preparation of one-dimensional structures of 4d and 5d transition metals (Nb, Mo, Ta, W) in the form of quasi-one-dimensional structures. One-dimensional metal structures are, due to their good electric conductivity and stability, appropriate materials for applications in nano-electronics as connections between nano-electronic elements. One-dimensional metal structures are also important as the starting material for the synthesis of sulphides, carbides and nitrides in the form of nanostructures, which extends the application of such materials into the field of heterogeneous catalysis.
Šifra	F.32	Mednarodni patent
Objavljeno v	European Patent Office; 2014; Avtorji / Authors: Jesih Adolf, Kovič Andrej, Mrzel Aleš	
Tipologija	2.23	Patentna prijava

8. Drugi pomembni rezultati programske skupine²

Rezultati programske skupine so bili predstavljeni v precejšnjem številu člankov in ostalih prispevkov, tudi v knjigah v obdobju 2008 – 2014. Še posebej pa nas veseli dejstvo, da so naša dela citirana tudi v knjigah, ki so pomembne za razvoj kemije in prenašanje znanja. V knjigi Comperhensive Inorganic Chemistry II (second edition), 2013, Glavna urednika: J. Reedijk in K. Poeppelmeier, so naša dela preteklih let citirana več kot štiridesetkrat. Med pomembne rezultate štejemo tudi uspešno organizacijo 16. evropskega simpozija o kemiji fluora, ki je potekal v Ljubljani od 18.-23. 7. 2010.

Velja omeniti tudi aktivnosti sodelavcev programske skupine na področju izobraževanja. Šola eksperimentalne kemije, v kateri sodelujejo člani programske skupine, ohranja izredno pomembne povezave inštituta s šolami, tako osnovnimi kot srednjimi, zanimanje pa je tudi v vrtcih. V obliki tečajev ali zgolj z obiski omogočamo učencem eksperimentiranje in odkrivanje lastnosti snovi. Na to tematiko so se navezovali tudi aktivnosti v sodelovanju s šolami, ki so potekale v okviru evropskega projekta KidsINNscience (projekt se je sredi leta 2013 tudi uspešno zaključil).

Člani programske skupine so vključeni v uredniške odbore različnih mednarodnih revij: Z. Mazej (Central European Journal of Chemistry (od 2006-)) in M. Ponikvar-Svet (Structural Chemistry (od 2010)), G. Tavčar in M. Tramšek (Acta Chim. Slovenica od 2013. Poleg tega so člani programske skupine pogosto tudi recenzenti številnim člankom za različne revije s področja kemije.

Nenazadnje za obdobje 2009 - 2014 velja omeniti, da je bil član programske skupine B. Žemva prejemnik Zoisove nagrade za življensko delo in tudi prejemnik priznanja Mentor leta za leto 2012.

9. Pomen raziskovalnih rezultatov programske skupine⁸

9.1. Pomen za razvoj znanosti⁹

SLO

Programska skupina Anorganska kemija in tehnologija predstavlja eno od vodilnih skupin v svetu na področju sinteze novih anorganskih spojin. Njeno najbolj prepoznavno raziskovalno področje predstavlja kemija fluora. Prednost skupine je v njeni raznolikosti in usposobljenosti članov programske skupine za izvedbo tudi najbolj zahtevnih sinteznih tehnik. Tekom let smo uspešno razvili vrsto sodelovanj z raziskovalci iz Evrope, Japonske, Kanade in ZDA. Širši svetovni pomen dolgoletnih raziskav programske skupine na področju kemije fluora se odraža tudi v nekaterih drugih aktivnostih skupine. Tako smo v letu 2010 v Ljubljani organizirali 16. evropski simpozij o kemiji fluora, ki združuje kemike iz vseh področij raziskav tega elementa.

Pokazatelj ugleda je tudi Zoisova nagrada za življenjsko delo, ki jo je prejel član programske skupine B. Žemva.

Nekateri izsledki raziskav naše raziskovalne skupine predstavljajo izjemen pomen za zakladnico znanj anorganske kemije (npr. sinteze novih binarnih fluoridov NiF_3 , NiF_4 , AgF_3 , raziskave fluoridov žlahtnih plinov kot ligandov).

Pomen, ki ga imajo raziskave programske skupine za razvoj znanosti, je viden iz številnih objav, tudi v najprestižnejših revijah na področju kemije kot so *Angewandte Chemie*, *Journal of American Chemical Society*, *Chemical Communication*, *Dalton Transactions*, *Inorganic Chemistry* in drugih. Pohvalimo se lahko tudi s prispevki članov programske skupine, ki so preglede raziskav podali v poglavjih v knjigah. Tukaj velja izpostaviti poglavje v knjigi *Comprehensive Inorganic Chemistry II* (Elsevier 2013). Še posebej pa nas veseli, da so naša dela citirana tudi v temeljnih strokovnih knjigah, ki so pomembne za razvoj kemije in prenos znanja. Temeljne raziskave dela skupine so dobra podlaga za bolj usmerjene raziskave materialov s posebnimi lastnostmi in njihovo nadaljnjo uporabo v industriji.

Tudi aplikativne in razvojne raziskave, ki uspešno rešujejo specifične tehnološko-razvojne probleme v skladu z glavnimi strateškimi prioritetami EU preraščajo meje Slovenije. Skupina je močno vpeta v sodelovanje v projektih EU s področja trajnostnega razvoja in varovanja okolja in tudi s področja energetike in učinkovite rabe energije.

ANG

The programme group Inorganic Chemistry and Technology is one of the leading groups in the world in the field of the syntheses of new inorganic compounds, especially in the area of fluorine chemistry. The advantage of the programme group lies in its diversity and qualifications of the members to carry out even the most demanding synthetic techniques. Over the years, we have successfully developed a series of collaborations with researchers from Europe, Japan, Canada and the United States.

The high importance of the long-standing programme is also reflected in some of the other activities of the group. In 2010, we organized 16th European Symposium on Fluorine Chemistry in Ljubljana, which brought together chemists from all the research areas of fluorine chemistry. Another indicator of the group's reputation is the Zois Award for Lifetime Achievement, received by B. Žemva.

Some of our research results have been very important for basic knowledge in the field of the inorganic chemistry (for example, the synthesis of new binary fluorides NiF_3 , NiF_4 , AgF_3 , research on the noble-gas fluorides as ligands).

The impact of the research group for the development of science is visible from many publications, including the most prestigious journals, such as *Angew. Chem.*, *J. Am. Chem. Soc.*, *Chem. Comm.*, *Dalton Trans.*, *Inorg. Chem.* and others. We should also highlight other activities of the members of the group: invited lectures at international meetings, referees for scientific journals, members of the editorial boards of journals (*Cen. Eur. J. Chem.*, *Acta Chim. Slov.*, *Structural Chem.*). We are proud of the members who presented their research work and reviews in several chapters in books. Here, a chapter in the book *Comprehensive Inorganic Chemistry II* (Elsevier 2013) should be emphasized. Our work is frequently cited in the books that are important for the development of chemistry and knowledge transfer. Fundamental research work is a good basis for the research of the materials with special properties and their subsequent use in industry.

Applicative research successfully solves specific technological and developmental problems in line with the main EU strategic priorities. The programme group is heavily involved in participation in EU projects in the field of sustainable development and environmental protection as well as in energy and energy efficiency.

9.2. Pomen za razvoj Slovenije¹⁰

SLO

Delo programske skupine je pomembno tudi za razvoj Slovenije. Tehnološke raziskave za trajnostni razvoj so eno izmed področij, ki je pomembno za slovensko industrijo. Raziskave na področju anorganskih spojin predstavljajo dobro izhodišče za razvoj novih materialov s posebnimi lastnostmi. Znanje in izkušnje pri tako zahtevnem raziskovalnem delu pa lahko pripomorejo k iskanju rešitev, ki jih potrebuje slovenska industrija.

Na področju tveganj za večje nesreče z nevarnimi snovmi (procesna varnost) smo tekom programskega financiranja sodelovali pri raziskavah na področju povezav med presojami

vplivov na okolje ter rezultati varnostnih analiz, kot tudi na izhodiščih za izbor vodilnih kazalcev o kvaliteti izvajanja varnostnih ukrepov. Omenjena področja imajo direkten pomen za prenos znanstvenih spoznanj v operativno prakso – kar pomeni tudi direktno sodelovanje z upravitelji industrijskih obratov v Sloveniji pri sistematičnem spremljanju kvalitete varnostnih prizadevanj (izbor in validacija izbranih varnostnih pokazateljev). Razvoj procesne varnosti poteka v tesnem sodelovanju z industrijo. Novejše raziskave s področja učinkovite rabe energije so v okviru evropskega projekta povezale tudi slovenske proizvajalce z raziskovalci in jim omogočili, da svoje delo in izdelke predstavijo širši javnosti.

Za nadaljnji razvoj Slovenije pa imajo nedvoumno vlogo tudi aktivnosti članov programske skupine v procesih izobraževanja. Člani programske skupine so vključeni v vse nivoje izobraževanja. Aktivno sodelujejo na Mednarodni podiplomski šoli Jožefa Stefana kot predavatelji in kot mentorji magistrskim in doktorskim študentom. Šola eksperimentalne kemije, ki ima več kot dvajsetletno tradicijo, deluje v okviru programske skupine. S svojimi aktivnostmi ohranja izredno pomembne povezave inštituta s šolami, tako osnovnimi kot srednjimi, zanimanje zanjo pa je tudi v vrtcih. V obliki tečajev ali zgolj z obiski omogočamo učencem eksperimentiranje in odkrivanje lastnosti snovi. S takšnimi oblikami neformalnega izobraževanja sledimo evropskim smernicam, s katerimi želimo med mladimi zbuditi več zanimanja za študij tehnike in naravoslovja.

ANG

The Programme group Inorganic Chemistry and Technology is successful in the field of technological research for sustainable development, which is very important for Slovenian industry. Research in the field of inorganic materials provides a good basis for the development of new materials with special properties. Knowledge and experiences in such demanding research work can contribute to finding solutions to the needs of Slovenian industry.

In the area of process safety (major accident prevention) we were involved in the research of relationships among environmental impact assessment and results of risk analysis, as well as on the approaches for selection of key safety performance indicators on the quality of safety measures. These topics have direct meaning for transfer of the scientific findings to the operational use – meaning also direct cooperation with the management of the industrial facilities in Slovenia related to the systematic observations (monitoring) of the quality of the safety efforts (selection and validation of selected performance indicators).

Recent research in the field of energy efficiency in the frame of the European project linked the Slovenian producers with researchers and enables them to present their work and products to a wider public.

An important influence for the further development of Slovenia in the future is linked to education. Members of the programme group are involved in all levels of education. They actively participate in the Jožef Stefan International Postgraduate School as lecturers and as mentors to M.Sc. and Ph.D. students. In addition, the School of Experimental Chemistry with twenty years long tradition maintained its very important relations with elementary, secondary schools and even kindergartens through experimental courses performed in a specialised laboratory or through direct demonstrations at the schools. Such forms of non-formal education are following the European guidelines to arouse more interest in technical and natural science studies among young people.

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

10.1. Diplome¹²

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

10.2. Magisterij znanosti in doktorat znanosti¹³

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

raziskovalca					
29296	Tine Oblak				
29932	Andrii Vakulka				
30880	Matic Lozinšek				
33433	Gleb Veryasov				

Legenda:

Mag. - Znanstveni magisterij

Dr. - Doktorat znanosti

MR - mladi raziskovalec

11. Pretok mladih raziskovalcev – zaposlitev po zaključenem usposabljanju¹⁴

Šifra raziskovalca	Ime in priimek	Mag.	Dr.	Zaposlitev	
29932	Andrii Vakulka			F - Drugo	
30880	Matic Lozinšek			E - Tujina	
33433	Gleb Veryasov			E - Tujina	

Legenda zaposlitev:

A - visokošolski in javni raziskovalni zavodi

B - gospodarstvo

C - javna uprava

D - družbene dejavnosti

E - tujina

F - drugo

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

Šifra raziskovalca	Ime in priimek	Sodelovanje v programski skupini	Število mesecev	
33433	Gleb Veryasov	C - študent – doktorand	02	
33432	Igor Shlyapnikov	C - študent – doktorand	01	
0	Wanderson Grazielli Men	C - študent – doktorand	04	
0	Clara Sousa Silva	C - študent – doktorand	02	
0	Ana Paula Fonseca Mend	C - študent – doktorand	02	
0	Alecia Tenessee Thomas	C - študent – doktorand	01	
0	Tomasz Michałowski	C - študent – doktorand	03	
0	Karthikeyan Amirthapanc	C - študent – doktorand	02	

Legenda sodelovanja v programski skupini:

A - raziskovalec/strokovnjak iz podjetja

B - uveljavljeni raziskovalec iz tujine

C - študent – doktorand iz tujine

D - podoktorand iz tujine

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

SLO

Člani programske skupine so vključeni v naslednje **raziskovalne programe Evropske unije:**

1. Novosti pri poučevanju naravoslovja, KidsINNscience, 7. OP, (T. Ogrin)
2. CIVITAS-ELAN: Mobilizacija meščanov za izboljšanje vitalnosti mest Ljubljana-Gent-Zagreb-Brno-Porto, 7. OP (M. Gerbec)
3. iNTeg-Risk; Zgodnje prepoznavanje, monitoring in celovito upravljanje s vzniklimi tveganji, ki izhajajo iz novih tehnologij, 7. OP, (M. Gerbec)
4. TOSCA; Popolno vodenje procesov pri varnostno kritičnih dejavnostih, 7. OP, (M. Gerbec)
5. EDEN: Uporabniško motivirana demonstracija obvladovanja CBRNe nesreč ali napadov 7.OP, (M. Gerbec - zunanji svetovalec)
6. FluoCoorChem – Fluorirani šibko koordinirajoči anioni za koordinacijsko kemijo nenavadnih ligandov, 7. OP, Marie Curie Actions (M. Lozinšek)
7. ACT CLEAN; Dostopnost do tehnologij in znanj na področju čiste proizvodnje, Central Europe Programme, (A. Stergaršek)
8. MED EMILIE; Krepitev sredozemskih pobud, ki majhna in srednje velika podjetja usmerjajo k inovacijam pri razvoju in rabi energijsko učinkovitih tehnologij, (G.Tavčar)
9. IPA ADRIACOLD; Širitev hladilnih in osveževalnih tehnologij z uporabo sončne energije v jadranski regiji, (G. Tavčar)

Druge oblike mednarodnega sodelovanja:

1. COST ES 1006; Vrednotenje, izboljšave in smernice za uporabo orodij za prognozo z zrakom prenešenih nevarnosti na lokalnem urbanim nivoju med izrednimi dogodki, COST akcija (M. Gerbec)

Bilateralni projekti

1. Optimiranje postopka razžveplevanja dimnih plinov (RDP) pri sintranju železove rude in v topilnicah svinca in cinka, BI-CN/07-09-020, (A. Stergaršek)
2. Eksperimentalne in teoretske študije molekularne adsorpcije na materialih z visoko površino ter drugi interakcijski procesi povezani s heterogeno katalizo, BI-MK/07-08-003, (T. Skapin)
3. Sinteze in raziskave termične stabilnosti fluoridov prehodnih in redkozemeljskih kovin, BI-RU/08-9-006 (Z. Mazej)

4. Pi-kompleksi bakrovih (I) fluoro-ionskih soli; sinteze in določitev kristalnih struktur, BI-UA/09-10-015
(Z. Mazej)

5. Napredni fluoro-ogljikovi materiali v obliki nano-mrež in njihove kemijske modifikacije, BI-US/08-10-018
(Z. Mazej)

6. Novi fluoridi dvovalentnega srebra in paladija: različne poti napram superprevodnosti, BI-PL/10-11-003
(Z. Mazej)

7. Volframov karbid: priprava fino uprašenih materialov, nanašanje tankih plasti iz talin in predelava industrijskih odpadkov, BI-UA/11-12-009
(M. Tramšek)

8. Selektivne sinteze fullerenskih superhalogenov in fluoriranih superšibkih anionov
BI-US/11-12-021
(B. Žemva)

9. Priprava aktivnega ogljika iz agrarne biomase z aktivacijo s fosforno kislino in njegova uporaba za odstranjevanje težkih kovin ter izboljšanje lastnosti katalizatorjev iz prehodnih elementov, BI-UA/13-14-003
(A. Jesih)

Ostale oblike mednarodnega sodelovanja:

1. Vzpostavitev znanstvenega sodelovanja med Slovenijo in Kanado na področju naprednih raziskav kemije žlahtnih plinov
McMaster University, Hamilton, Kanada
(B. Žemva)

2. Raziskave koordinacijske kemije kriptonovega difluorida
McMaster University, Hamilton, Kanada
(B. Žemva)

Neformalno sodelovanje:

Aichi Institute of Technology, Toyota, Japonska
University of Warsaw, Varšava, Poljska
Georg-August-Universität, Göttingen, Nemčija
Kyoto University, Kyoto, Japonska
Colorado State University, Fort Collins, Colorado, ZDA
Humboldt-Universität zu Berlin, Nemčija
Moscow State University, Moskva, Rusija
Ivan Franko University, Lviv, Ukrajina
University of Maryland, Baltimore, ZDA
University of Manchester, Manchester, Velika Britanija
University of Glasgow, Glasgow, Velika Britanija
Carnegie Institution, Washington, USA.
Freie Universität Berlin, Berlin, Nemčija
Technische Universität Chemnitz, Chemnitz, Nemčija
Université Catholique de Louvain, Louvain-la-Neuve, Belgija

Johannes Gutenberg-Universität, Mainz, Nemčija
Université Paris-Sud, Orsay, Pariz, Francija
Univerzitet Sv. Cirila i Metoda, Skopje, Makedonija
NAS Ukraine, Kijev, Ukrajina
Zhejiang University, LCEU, Hangzhou, Kitajska

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

SLO

Člani programske skupine so bili oz. so vključeni v naslednje projekte za uporabnike izven financiranja ARRS:

1. Svetovalne storitve pri uvajanju spremljanja stanja varnostno pomembnejših komponent, Istrabenz plini d.o.o.
(M. Gerbec)
2. Razvoj tehnološkega postopka za povečanje učinkovitosti izločanja žveplovega dioksida in živega srebra iz dimnih plinov, Esotech, d. d.
(A. Stergaršek)
3. Analiza zanesljivosti plinovodnega sistema s katerim upravlja Geoplin plinovodi d.o.o., Geoplin plinovodi d.o.o.
(M. Gerbec)
4. Svetovalne storitve pri noveliranju varnostnega poročila, Zavod Republike Slovenije za blagovne rezerve
(M. Gerbec)
5. Obdelava in priprava radioaktivnih odpadkov malih povzročiteljev, ARAO
(G. Tavčar)
6. Varnostni načrt upravljavca za plinovodno omrežje družbe Geoplin plinovodi d.o.o., Geoplin plinovodi d.o.o.
(M. Gerbec)
7. Ocena ogroženosti za plinovodno omrežje družbe Geoplin plinovodi d.o.o. – razširitev, Geoplin plinovodi d.o.o.
(M. Gerbec)
8. Varnostno poročilo za Nafta Petrochem d.o.o, Nafta Petrochem d.o.o,
(M. Gerbec)
9. Izredni dogodki v načrtovani tovarni F-4 v Nafti Petrochem d.o.o., Nafta Petrochem d.o.o.
(M. Gerbec)
10. Presoja sistema obvladovanja varnosti in pregled Varnostnega poročila, Instalacija d.o.o.
(M. Gerbec)
11. Varnostno poročilo za skladišče naftnih derivatov Ortnek : strokovne podlage, Zavod Republike Slovenije za blagovne rezerve
(M. Gerbec)
12. Analiza virov nevarnosti za dejavnosti TE-TO Ljubljana, Termoelektrarna

in toplarna Ljubljana
(M. Gerbec)

13. Svetovalne storitve in izdelava strokovnih podlag za Zasnovo zmanjšanja tveganja za okolje, Termoelektrarna Brestanica
(M. Gerbec)

14. Novelirana ocena čezmejnih vplivov na okolje za terminala Alpe Adriatico v Tržaškem zalivu in Žavljah - vidik izrednih dogodkov, Ministrstvo za okolje in prostor RS
(M. Gerbec)

15. Ekspertna analiza čezmejnega vpliva projekta plinskega terminala v Tržaškem zalivu in plinovoda – segment nesreče, Ministrstvo za kmetijstvo in okolje RS
(M. Gerbec)

16. Analize topnih delov katalizatorja, Porzellanfabrik Frauenthal GmbH
(G. Tavčar)

17. Fluorirani ogljiki
(Z. Mazej)

18. Strokovna mnenja, udeležba na tehničnem posvetovanju in prezentacije na področju segmenta Nesreče in tveganje z vplivom živega srebra v tržaškem zalivu
(M. Gerbec)

19. Metodologija fiksacije CO₂ na elektrofiltrskem pepelu, RCE - Razvojni Center Energija d. o. o.
(R. Kocjančič)

20. Metodologija fiksacije CO₂ na elektrofiltrskem pepelu - na segmentu metodologije in raziskave sorpcijskih lastnosti premoga, RCE - Razvojni Center Energija d. o. o.
(G. Tavčar)

21. Razvoj tehnologije pridobivanja bakra iz odpadnih ribiških mrež s pomočjo termičnega razklopa, Ekologija d.o.o.
(R. Kocjančič)

22. Konstrukcija sorbometra, Premogovnik Velenje
(T. Skapin)

15. Ocena tehnološke zrelosti rezultatov raziskovalnega programa in možnosti za njihovo implementacijo v praksi (točka ni namenjena raziskovalnim programom s področij humanističnih ved)¹²

SLO

Ocenjujemo, da imajo nekateri rezultati programa možnost za uporabo v praksi. Navajamo izsledke takšnih področij raziskav.

Del primernih raziskav za uporabo v praksi je s področja anorganskih materialov s posebnimi lastnostmi, ki so potekale v sodelovanju z odsekom Kompleksne snovi (IJS) in Centrom odličnosti Nanocentrom. V preteklih letih smo razvili postopek priprave enodimenzionalnih struktur 4d in 5d (Nb, Mo,

Ta, W) prehodnih kovin in postopek za sintezo 4d in 5d (Nb, Mo, Ta, W) nitridov prehodnih kovin v obliki kvazi enodimenzionalnih struktur. Zaradi dobre prevodnosti in stabilnosti enodimenzionalnih kovinskih struktur so le-te primerne za uporabo v nano-elektroniki, kot povezava med elektronskimi elementi nano dimenzij in za površine občutljive na dotik. Postopek priprave nitridov prehodnih kovin v obliki nano delcev je zaščiteno s patentno prijavo in omogoča enostavno pripravo večjih količin nitridov, ki kažejo superprevodne lastnosti pri nizkih temperaturah. Poleg tega je uporaba teh nano materialov primerna za sintezokatalitsko aktivnih nanostruktur dihalogenidov. Prednost razvitih postopkov je enostavna priprava nanomaterialov v večjih količinah, ki so potrebne za uporabo v industrijske namene. Celulozne in PES tkanine z nanosom antimikrobnega plazemskega polimera, ki so bile razvite v sklopu Centra odličnosti Polimat, so primerne za uporabo v medicini in sicer kot sestavni del obvez in oblog, ki so v stiku s kožo ali ranami.

Drugo področje sodi v sklop tehnoloških raziskav za trajnostni razvoj. Na področju upravljanja s tveganji za večje nesreče so naše raziskave praviloma tesno povezane z industrijski partnerji. Nova znanja glede preprečevanja večjih nesreč je težko neposredno denarno vrednotiti, izkušnje pa kažejo da raziskave in analize praviloma privedejo do varnostnih izboljšav, ki jih industrija projektno implementira. Podobno velja za ekspertize ki jih naročajo državni organi (npr., mednarodni spori, upravni postopki), njihov družbeni pomen pa je nesporen.

16. Ocenite, ali bi doseženi rezultati v okviru programa lahko vodili do ustanovitve spin-off podjetja, kolikšen finančni vložek bi zahteval ta korak ter kakšno infrastrukturo in opremo bi potrebovali

možnost ustanovitve spin-off podjetja	☒ DA ☐ NE
potrebni finančni vložek	100.000.000 EUR
ocena potrebne infrastrukture in opreme ¹⁸	Doseženi rezultati so nedvomno kvalitetni in omogočajo osnovo za ustanovitev podjetja. Za spin-off podjetje bi potrebovali prostor v izmeri približno 300 m ² , dve industrijski peči kapacitete 200 kg, SEM, AFM, FTIR, 3 digestorije, dvigalo in kemijski laboratorij s potrebno analitsko opremo.

17. Izjemni dosežek v letu 2014¹⁹

17.1. Izjemni znanstveni dosežek

Izjemni znanstveni dosežek v letu 2014 predstavljajo raziskave s področja žlahtnih plinov. Izsledki raziskav so bili objavljeni v prestižni reviji Angewandte Chemie, 53, 2014, 13713-13719.

V prispevku so predstavljeni rezultati raziskav termičnih reakcij med srednje močno Lewisovo bazo ksenonovim difluoridom (XeF₂) in titanovim tetrafluoridom (TiF₄). S pomočjo Ramanske spektroskopije smo se osredotočili predvsem na razlago reakcijskih mehanizmov, ki pogojujejo nastanek novega tipa Xe(II)-soli s polimernimi anioni: [XeF]₂[Ti₉F₃₈] in [Xe₂F₃][Ti₈F₃₃]. Nastala eno- in dvodimenzionalna aniona, najdena v strukturah teh produktov, kažeta nepričakovano sposobnost vzdrževanja relativno visoko ioniziranih oblik XeF₂, kar je bilo do sedaj mogoče le z uporabo najmočnejših Lewisovih kislin (npr. SbF₅). Uporabljen sintezni način in metoda kristalizacije pa odpirata tudi nove možnosti za tvorbo termodinamsko zelo obstojnih spojin XeF⁺ in Xe₂F₃⁺ z anioni drugih, šibkejših Lewisovih kislin.

17.2. Izjemni družbeno-ekonomski dosežek

Kot izjemni družbeno-ekonomski dosežek izpostavljam izgradnjo raziskovalno-izobraževalnega

energijskega poligona EMILIE InfraSUN.

Na IJS je sredi leta 2014 začel pilotni objekt InfraSUN, ki temelji na integraciji najmodernejših sončnih termalnih tehnologij v enovit sistem ogrevanja in hlajenja prostorov z energijo sonca ter prikazu uporabe 'sonca kot infrastrukture'. Namen sistema je preizkusiti inovativne energetske tehnologije, pokazati njihovo zrelost zlasti pri uporabi sončne energije ter ponuditi možnost prikaza konkretnih sistemskih rešitev z najnovejšimi tehnologijami s področja obnovljivih virov in energetske učinkovitosti. V pilotnem objektu preizkušamo sistemske rešitve ogrevanja in hlajenja s termalnimi sončnimi tehnologijami, nekatere od teh so slovenskega znanja in raziskav, ter sisteme za rabo odpadne toplote. Energijski poligon služi tudi kot demonstracijski objekt na katerem izvajamo izobraževanja.

C. IZJAVE

Podpisani izjavljam/o, da:

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

Podpisi:

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

in

vodja raziskovalnega programa:

Institut "Jožef Stefan"

Gašper Tavčar

ŽIG

Kraj in datum:

V Ljubljani

13.3.2015

Oznaka poročila: ARRS-RPROG-ZP-2015/27

¹ Napišite povzetek raziskovalnega programa v slovenskem jeziku (največ 3.000 znakov vključno s presledki – približno pol strani, velikost pisave 11) in angleškem jeziku (največ 3.000 znakov vključno s presledki – približno pol strani, velikost pisave 11). [Nazaj](#)

² Napišite kratko vsebinsko poročilo, v katerem predstavite raziskovalno hipotezo in opis raziskovanja. Navedite ključne ugotovitve, znanstvena spoznanja, rezultate in učinke raziskovalnega programa in njihovo uporabo ter sodelovanje s tujimi partnerji. V primeru odobrenega povečanja obsega financiranja raziskovalnega programa v letu 2014 mora poročilo o realizaciji programa dela zajemati predložen program dela ob prijavi in predložen dopolnjen program dela v letu 2014. Največ 12.000 znakov vključno s presledki (približno dve strani, velikosti pisave 11). [Nazaj](#)

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

⁴ V primeru bistvenih odstopanj in sprememb od predvidenega programa dela raziskovalnega programa, kot je bil zapisan v predlogu raziskovalnega programa oziroma v primeru sprememb, povečanja ali zmanjšanja sestave programske skupine v zadnjem letu izvajanja raziskovalnega programa, napišite obrazložitev. V primeru, da sprememb ni bilo, navedite: "Ni bilo sprememb.". Največ 6.000 znakov vključno s presledki (približno ena stran, velikosti pisave 11). [Nazaj](#)

⁵ Navedite znanstvene dosežke (največ pet), ki so nastali v okviru izvajanja raziskovalnega programa. Raziskovalni dosežek iz obdobja izvajanja programa vpišete tako, da izpolnite COBISS kodo dosežka – sistem nato sam izpolni naslov objave, naziv, IF in srednjo vrednost revije, naziv FOS področja ter podatek, ali je dosežek uvrščen v A" ali A'. [Nazaj](#)

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

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

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

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

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

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

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

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

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

¹³ Vpišite šifro raziskovalca in/ali ime in priimek osebe, ki je v času izvajanja raziskovalnega programa pridobila naziv magister znanosti in/ali doktor znanosti ter označite doseženo izobrazbo. V primeru, da se je oseba usposabljala po programu Mladi raziskovalci, označite "MR". [Nazaj](#)

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

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

¹⁶ Navedite naslove projektov, ki ne sodijo v okvir financiranja ARRS (npr: industrijski projekti, projekti za druge naročnike, državno upravo, občine idr.) in ime člana programske skupine, ki je bil vodja/koordinator navedenega projekta. Največ 6.000 znakov vključno s presledki (približno ena stran, velikosti pisave 11). [Nazaj](#)

¹⁷ Opišite možnosti za uporabo rezultatov v praksi. Opišite izdelke oziroma tehnologijo in potencialne trge oziroma tržne niše, v katere sodijo. Ocenite dodano vrednost izdelkov, katerih osnova je znanje, razvito v okviru programa oziroma dodano vrednost na zaposlenega, če jo je mogoče oceniti (npr. v primerih, ko je rezultat izboljšava obstoječih tehnologij oziroma izdelkov). Največ 3.000 znakov vključno s presledki (približno pol strani, velikosti pisave 11). [Nazaj](#)

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

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

Obrazec: ARRS-RPROG-ZP/2015 v1.00b

B9-80-6B-F0-F9-3C-F0-86-7B-47-10-65-3D-BC-AF-70-0E-E2-7E-A4

Priloga 1

Veda: Naravoslovje

Področje: 1.04 Kemija

Dosežek 1: Izgradnja raziskovalno-izobraževalnega energijskega poligona EMILIE InfraSUN kot platforme za vrednotenje inovativnih tehnologij na področju energetske učinkovitih stavb



Na Institutu »Jožef Stefan« je sredi leta 2014 začel pilotni objekt InfraSUN, ki je zasnovan kot raziskovalno-izobraževalni energijski poligon, ki temelji na integraciji najsodobnejših sončnih termalnih tehnologij v enovit sistem ogrevanja in hlajenja prostorov z energijo sonca ter prikazu uporabe 'sonca kot infrastrukture'. Sistem je nastal v okviru mednarodnega projekta EMILIE (www.emilieproject.eu), čigar namen je preizkusiti inovativne energetske tehnologije, pokazati njihovo zrelost zlasti pri uporabi sončne energije ter ponuditi možnost prikaza konkretnih sistemskih rešitev z najnovejšimi tehnologijami s področja obnovljivih virov in energetske učinkovitosti. V pilotnem objektu preizkušamo systemske rešitve ogrevanja in hlajenja s termalnimi sončnimi tehnologijami, nekatere od teh so slovenskega znanja in raziskav, ter sisteme za rabo odpadne toplote. Energijski poligon služi tudi kot demonstracijski objekt na katerem izvajamo izobraževanja, ki so v prvi vrsti namenjena malim in srednje velikim podjetjem ter upravnim organom, ki skrbijo za spodbujanje energetske učinkovitosti in rabe obnovljivih virov energije, pa tudi širši zainteresirani javnosti.

Foto: Marjan Smerke

InfraSUN temelji na rabi sončne toplote kot obnovljivega vira energije namesto električne energije za hlajenje in plina za (d)ogrevanje prostorov. Potreba po hlajenju pogosto sovпада z razpoložljivostjo sončne energije, zato se solarno hlajenje kaže kot možna alternativa konvencionalnim električnim kompresorskim hladilnim sistemom.

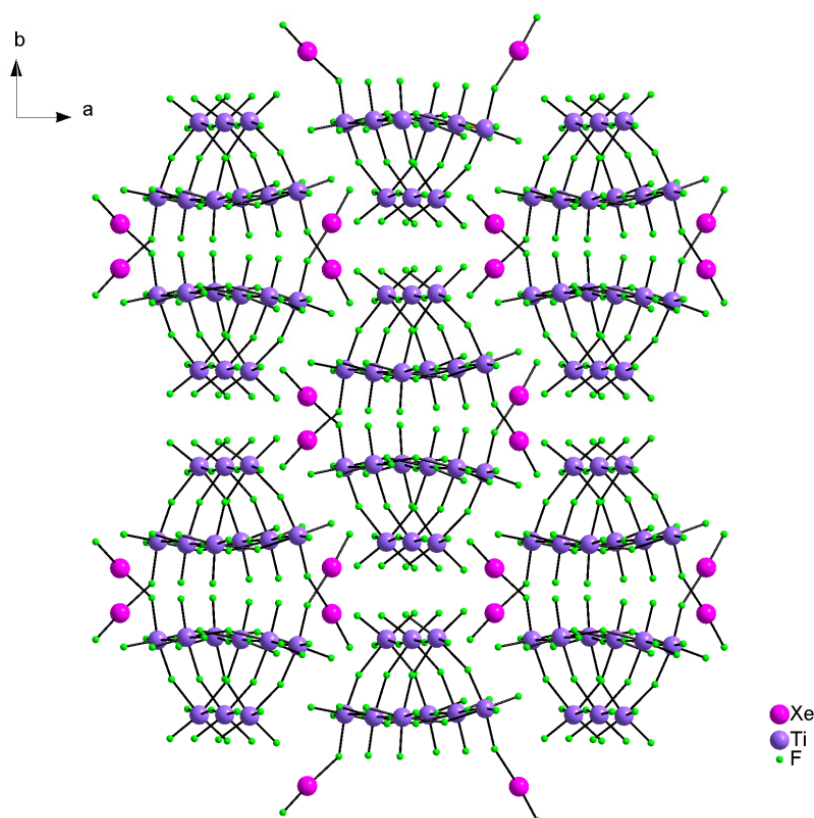
Priloga 2

VEDA: Naravoslovje

Področje: 1.04 Kemija

Dosežek 1: Ksenonovi(II) polifluoridotitanati(IV).

Vir: Angewandte Chemie; 2014; Vol. 53, no. 50; str. 13713-13719



V prispevku so predstavljeni rezultati raziskav termičnih reakcij med srednje močno Lewisovo bazo ksenonovim difluoridom (XeF_2) in titanovim tetrafluoridom (TiF_4). S pomočjo Ramanske spektroskopije smo se osredotočili predvsem na razlago reakcijskih mehanizmov, ki pogojujejo nastanek novega tipa Xe(II)-soli s polimernimi anioni: $[\text{XeF}]_2[\text{Ti}_9\text{F}_{38}]$ in $[\text{Xe}_2\text{F}_3][\text{Ti}_8\text{F}_{33}]$. Nastala eno- in dvodimenzionalna aniona, najdena v strukturah teh produktov, kažeta nepričakovano sposobnost vzdrževanja relativno visoko ioniziranih oblik XeF_2 , kar je bilo do sedaj mogoče le z uporabo najmočnejših Lewisovih kislin (npr. SbF_5). Uporabljen sintezni način in metoda kristalizacije pa odpirata tudi nove možnosti za tvorbo termodinamsko zelo obstojnih spojin XeF^+ in Xe_2F_3^+ z anioni drugih, šibkejših Lewisovih kislin.