

Oznaka poročila: ARRS-RPROJ-ZP-2013/98



ZAKLJUČNO POROČILO RAZISKOVALNEGA PROJEKTA

A. PODATKI O RAZISKOVALNEM PROJEKTU

1. Osnovni podatki o raziskovalnem projektu

Šifra projekta	J1-2281
Naslov projekta	Razvoj in aplikacija večskalnih modelskih pristopov za simulacijo mehke snovi
Vodja projekta	19037 Matej Praprotnik
Tip projekta	J Temeljni projekt
Obseg raziskovalnih ur	4173
Cenovni razred	C
Trajanje projekta	05.2009 - 04.2012
Nosilna raziskovalna organizacija	104 Kemijski inštitut
Raziskovalne organizacije - soizvajalke	
Raziskovalno področje po šifrantu ARRS	1 NARAVOSLOVJE 1.07 Računsko intenzivne metode in aplikacije
Družbeno-ekonomski cilj	13.01 Naravoslovne vede - RiR financiran iz drugih virov (ne iz SUF)

2. Raziskovalno področje po šifrantu FOS¹

Šifra	1.03
- Veda	1 Naravoslovne vede
- Področje	1.03 Fizika

B. REZULTATI IN DOSEŽKI RAZISKOVALNEGA PROJEKTA

3. Povzetek raziskovalnega projekta²

SLO

Relevantna energijska skala v mehki snovi je termična energija kT. Konformacijska entropija je istega reda kot intermolekularna energija in njuna medigra tipično določa relevantne lastnosti snovi. Značilno za mehko snov je zato širok razpon krajevnih in časovnih skal, ki so med seboj prepletene. Večskalni modelski pristopi predstavljajo najučinkovitejši način za premostitev več

redov velikosti v krajevnih in časovnih skalah sistema. V tem kontekstu, razvijamo večskalno metodo Adaptive Resolution Scheme (AdResS) za učinkovite hibridne atomistično-mezoskopske simulacije molekulske dinamike. Ključna lastnost te delčne metode je, da dovoljuje dinamično izmenjavo molekularne resolucije s spreminjanjem števila molekularnih prostostnih stopenj v letu, med samim potekom simulacije. Na ta način je vseatomski molekularni sistem v termodinamičnem ravnovesju z močno poenostavljenim grobozrnatim sistemom. Naš pristop, ki istočasno sklaplja atomske in mezoskopske krajevne skale, vodi do koncepta geometrijsko inducirane fazne prehoda in posplošitve ekviparticijskega izreka na necele prostostne stopnje. Do sedaj smo metodo AdResS uporabili na molekularnih tekočinah. Sistem modeliramo v različnih domenah na različni stopnji detajla, medtem ko se molekule prosto gibljejo med regijami. Primeri obravnavanih sistemov so enostavna tekočina tetraedričnih molekul, tekoča voda, in splošna makromolekula v topilu.

Cilj predlaganega projekta je razširitev tega pristopa na simulacije večkomponentnih tekočin, npr. soli, makromolekul, npr. proteinov, in vključitev kontinuumskega opisa tekočine v model. Naš namen je izvedba triskalnih simulacij molekularnih tekočin, npr. tekoče vode, z istočasno sklopitvijo atomskega, mezoskopskega in kontinuumskega opisa tekočine. Triskalni pristop, ki bo pokrival krajevne skale, raztezajoč se od mikro do makro skale, bo omogočil izvedbo učinkovitih velekanoničnih simulacij molekulske dinamike odprtih molekularnih sistemov.

ANG

The relevant energy scale in soft matter systems is the thermal energy kT . The conformational entropy is of the same order as the intermolecular energy, and their interplay usually determines the relevant properties. Soft matter is hence characterized by a wide range of length and time scales that are intrinsically interconnected. Multiscale modeling approaches represent the most efficient way to bridge many orders of magnitude in the spatial and temporal scales involved in these systems. In this context, we have been developing the Adaptive Resolution Scheme (AdResS) for efficient hybrid atomistic/mesoscale molecular dynamics (MD) simulations. The key feature of this particle-based method is that it allows for a dynamical change of molecular resolution by changing the number of molecular degrees of freedom on-the-fly during the course of an MD simulation. In this way an all-atom molecular system is maintained at thermodynamical equilibrium with a far simpler coarse-grained system. Our approach, which concurrently couples the atomic and mesoscopic length scales of the system, leads to a concept of a geometry induced phase transition and a generalization of the equipartition theorem to fractional degrees of freedom. So far, we have applied AdResS to molecular liquids. The system is modeled in different domains at different levels of detail while the liquid molecules move freely between the regions. Examples are a simple liquid of tetrahedral molecules, liquid water, and a generic solvated macromolecule.

The goal of the proposed project is to extend the approach to simulations of multicomponent liquids, e.g., salts, macromolecules, e.g., proteins, and to include the continuum description of the liquid in the model. Our purpose is to perform a triple-scale simulation of molecular liquids, e.g., liquid water, by concurrently coupling the atomistic, mesoscopic, and continuum descriptions of the liquid. The triple-scale approach, which will cover the length-scales ranging from the micro- to macro-scale, will open up the possibility to perform efficient grand-canonical MD simulations of truly open molecular liquid systems.

4. Poročilo o realizaciji predloženega programa dela na raziskovalnem projektu³

Veliko procesov v molekularnih tekočinah in mehki snovi vsebuje velik razpon različnih časovnih in krajevnih velikostnih skal, ki so med seboj prepletene. Relevantne lastnosti sistema so tako tipično določene z medigro vpletenih časovnih in krajevnih skal. Vseatomske simulacije, ki zaobjamejo pojave na atomski skali, so pogosto računsko neizvedljive ali celo nezaželene zaradi velikega števila prostostnih stopenj v teh sistemih. Bolj grobozrnatih modeli ali kontinuumske simulacije, po drugi strani, lahko pokrijejo veliko daljše časovne in krajevne skale, a ne morejo podati informacije na atomski resoluciji. Večskalne tehnike modeliranja, ki istočasno sklapljajo različne krajevne skale, tako predstavljajo zelo učinkovit način za obravnavo takšnih sistemov z računalniško simulacijo. Z večskalnim pristopom poenostavimo fizikalni model do največje možne stopnje, pri čemer pa zadržimo vse pomembne podrobnosti v tistih delih sistema, kjer je to potrebno. Pred začetkom financiranja tega projekta smo nekaj let razvijali večskalno metodo za simulacijo molekulske dinamike, ki istočasno sklaplja atomske in mezoskopske krajevne skale. Pri tem v letu spreminjamo stopnjo krajevne resolucije med atomsko in mezoskopsko krajevno skalo znotraj ene same simulacije molekulske dinamike. Metodo smo do začetka financiranja tega projekta uporabili le za simulacijo enostavnih molekularnih tekočin, npr. vode, sestavljenih iz molekul ene same vrste. Nadaljna omejitev tega pristopa je bila v tem, da smo lahko te simulacije izvajali le s

konstantnim številom molekul v sistemu.

V okviru projekta smo dosegli:

1. Uporabnost metode AdResS za večskalno simulacijo molekulske dinamike smo razširili na makromolekule, kjer se lahko makromolekula razteza čez več območij z različno resolucijo. Do sedaj je bila metoda AdResS omejena na uporabo za sisteme tekočin manjših molekul, kjer se molekule raztezajo znotraj ene domene z določeno resolucijo. Da preprečimo umetno raztezanje in krčenje makromolekule, moramo v razširjenem pristopu poenotiti dinamiko in strukturo makromolekule v območjih z različno resolucijo. To storimo z uporabo za v ta namen razvitega termostata in termodinamske sile, ki je definirana kot negativni gradient kemijskega potenciala. Makromolekula potem prosto prehaja čez mejo območij z različno resolucijo, brez kakršnih koli deformacij, ki bi bile posledica sklopitve opisov na različnih krajevnih skalah. Delo je objavljeno v: *J. stat. phys.*, 2011, vol. 145, no. 4, 946-966 str., ilustr., doi: [10.1007/s10955-011-0312-x](https://doi.org/10.1007/s10955-011-0312-x). [COBISS.SI-ID [4764186](#)]

2. Razvili smo posplošeno metodo AdResS z vključitvijo termodinamske sile v opis interakcij. Praktična izvedba simulacije z adaptivno resolucijo zahteva ne le termodinamskega ravnovesja med grobozrnatim in fino zrnatim režimom ampak tudi odsotnost barier v medfaznem območju. Slednje omogoča prosto izmenjavo molekul čez območja z različno resolucijo, kar je potrebno za pravilen opis fluktuacij v sistemu. V idealnem primeru to dosežemo, če je enačba stanja enaka po vsem sistemu. To pa je praktično nedosegljivo. Z uvedbo termodinamske sile, ki je definirana kot negativni gradient presežnega kemijskega potenciala, rešimo ta problem in dosežemo želeni ravni gostotni profil čez ves sistem. Na osnovi tako izboljšane originalne sheme smo uporabo naše metodologije razširili na zmesi različnih molekularnih vrst kot tudi polimernih zmesi. Delo je bilo objavljeno v: *J. chem. phys.*, 2010, vol. 132, str. 114101-1-114101-7. [COBISS.SI-ID [4379162](#)]

3. Razvili smo večskalni model soli (NaCl). V ta namen smo razvili grobozrnat model soli, ki ga preko metode AdResS sklopimo z atomističnim modelom. Elektrostaticne interakcije opišemo s posplošeno metodo reakcijskega polja, kjer do določene oddaljenosti od določene molekule sosede opišemo eksplicitno, za večje razdalje pa uporabimo kontinuumski opis, kjer sol opišemo z dielektrično konstanto. Tako razviti model soli bomo uporabili za učinkovite simulacije biomolekularnih sistemov, npr. sistema molekul DNK v heksagonalni in ortorombski fazi. Članek je v pripravi.

4. Metodo AdResS smo z našimi partnerji na Max Planck Institute for Polymer Research, Mainz, Nemčija vgradili v simulacijski paket Espresso++ za simulacijo molekulske dinamike molekularnih tekočin in mehke snovi. Metodo smo paralelizirali, tako da se simulacija z adaptivno resolucijo istočasno izvaja na številnih procesorjih. Na ta način znatno pohitrimo simulacijo z adaptivno resolucijo in tako povečamo njen doseg in uporabnost, obenem pa z vgradnjo metode v Espresso++ omogočimo dostop do uporabe metode širokemu krogu uporabnikov. Z programskim paketom Espresso++ bo možno izvajati simulacije adaptivne resolucije na realističnih biomolekularnih sistemih, npr. proteini v vodi, Delo je bilo objavljeno v: *Comput. phys. commun.*. [Print ed.], 2013, vol. 184, issue 4, str. 1129-1149. [COBISS.SI-ID [5164058](#)]

5. Razvili smo tudi triskalni model tekoče vode, ki pokriva krajevne skale z razponom od mikro do makroskale. Triskalni model vode predstavlja nadaljnji razvoj našega triskalnega pristopa AdResS-HybridMD, katerega uporaba je bila doslej omejena na nepolarne tekočine. Naš triskalni pristop je kombinacija dveh dvoskalnih pristopov: delčne AdResS in hibridne sheme Hybrid MD. Slednja temelji na izmenjavi tokov med delčno domeno, ki jo obravnavamo s simulacijo molekulske dinamike, in kontinuumom opisanim z Navier-Stokesovo enačbo. V triskalni simulaciji smo pokazali, da je triskalna hibridna metoda robustna glede na podrobnosti grobozrnatega modela vode, kar je posledica ohranjanja gibalne količine, ki jo zagotavlja AdResS. Naša triskalna hibridna metoda omogoča vstavljanje relativno kompleksnih molekul v gosto vseatomsko tekocino (kjer je vstavljanje otežavljeno zaradi steričnih ovir) preko grobozrnate domene z mehкими medmolekularnimi interakcijami. Pomemben rezultat našega pristopa je, da je delčna domena odprta in izmenjuje molekule s kontinuumom. Naša metoda zato kot prva omogoča izvedbo velekanoničnih simulacij molekulske dinamike, v katerih število molekul sistema ni konstantno. V naših simulacijah smo z uporabo novega pristopa pokazali, da se masne fluktuacije v triskalni shemi ujemajo s teoretičnimi napovedi velekanoničnega

ansambla. Naš pristop prav tako omogoča izvedbo simulacij molekulske dinamike pod neravnovesimi pogoji. Pokazali smo, da se hitrostni profil Couettevega in Stokesovega toka v triskalnem modelu ujema s teoretično napovedjo kontinuumskega opisa tekočine z Navier-Stokesovo enačbo. Delo je objavljeno v: *J. chem. phys.*, 2009, vol. 131, no. 24, str. 244107-1-244107-6., doi: [10.1063/1.3272265](https://doi.org/10.1063/1.3272265). [COBISS.SI-ID [4329754](https://www.cobiss.si/id/4329754)]

6. S sodelavci iz Medicinske fakultete v Ljubljani, UL smo razvili spletno aplikacijo ENZO (<http://enzo.cmm.ki.si>) za enostavno izpeljavo kinetičnih modelov encimskih reakcij. ENZO sestoji iz grafičnega vmesnika, s katerim narišemo reakcijsko shemo. ENZO avtomatsko generira pripadajoče diferencialne enačbe in njihovo numerično rešitev prilaga k eksperimentalnim krivuljam. Na ta način lahko hitro in učinkovito določimo pripadajoč kinetični model določeni encimski reakciji, ki jo eksperimentalno študiramo. Rezultate smo objavili v članku *PLoS one*, jul. 2011, vol. 6, iss. 7, str. e22265, ilustr., doi: [10.1371/journal.pone.0022265](https://doi.org/10.1371/journal.pone.0022265). [COBISS.SI-ID [4728090](https://www.cobiss.si/id/4728090)].

7. Izvedli smo simulacijo tridimenzionalnega tekočinskega toka vode mimo molekule fullerena. V ta namen smo razvili novo hibridno atomistično/kontinuumsko metodo za simulacijo tridimenzionalnih tekočinskih tokov mimo molekule fullerena. Nova metoda sklaplja simulacijo molekulske dinamike z Navier-Stokesovo enačbo z uporabo tridimenzionalne medfaze in omogoča študij tekočinskih tokov na nanoskali, ki so izven dosega tako simulacije molekulske dinamike kot tudi kontinuumskega opisa tekočine. Z novo razvito metodo smo določili neznane robne pogoje za tekočinski tok na površini molekule in določili njen hidrodinamski radij.

8. Naše raziskovalno delo smo predstavili v obliki vabljenih predavanj na mednarodnih konferencah.

Pri našem raziskovalnem delu smo sodelovali s skupinami iz Max Planck for Polymer Research, Mainz, Nemčija in Universidad Autonoma de Madrid, Madrid, Španija in ETH Zurich, Švica.

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

Cilji projekta so bili :

- a) Uporaba večskalne metode AdResS za simulacijo molekulske dinamike, ki istočasno sklaplja atomistično in mezoskopsko krajevni skali, za večkomponentne tekočine, npr. soli.
- b) Razširitev uporabnosti sheme na makromolekule, kjer bomo različne dele makromolekule modelirali na različnih stopnjah detajla. Npr., blizu vezavnega mesta na proteinu, kjer igra kemijska specifičnost pomembno vlogo, bomo protein opisali na atomski skali, bolj oddaljene dele proteina pa bomo modelirali z bolj grobozrnatim opisom.
- c) Vključitev makroskopske krajevne skale v model, t.j., kontinuumski opis tekočine z Navier-Stokesovo enačbo. Triskalni pristop bo omogočil simulacijo odprtih sistemov v velekanoničnem ansamblu.

Končni cilj projekta je bila izvedba večskalnih simulacij, ki bodo omogočale doseg eksperimentalnih krajevnih in časovnih velikostnih skal biofizikalno relevantnih sistemov (npr. proteinov in lipidnih membran).

Iz točke 4. je razvidno, da smo realizirali vse zastavljene raziskovalne cilje projekta:

- a) Naše metode smo združili z opisom elektrostatike s posplošeno metodo reakcijskega polja in vključitvijo termodinamske sile, kar omogoča izvajanje simulacij večkomponentnih tekočin, npr. soli.
- b) Uporabo metod smo razširili na makromolekule, ki se raztezajo čez več domen z različno resolucijo. To omogoča študij interakcij proteinov s stenami (npr. metalnimi površinami), kjer potrebujemo podroben opis proteina blizu stene, daleč stran pa zadošča bolj grobozrnat opis.
- c) Izvedli smo triskalno simulacijo tekoče vode kot najpomembnejšega topila v naravi, v kateri smo istočasno sklopili atomski, mezoskopski, in kontinuumski opis tekočine. Naš pristop omogoča odprte simulacije molekularnih tekočin, razširitev na kompleksne tekočine (talina zvezdastih polimerov) pa je že v teku.

Tridimenzionalna simulacija tekočinskega toka vode mimo molekule fullerena že predstavlja prvo simulacijo realističnega kompleksnega sistema. Večskalna metoda je petnajstkrat hitrejša

od vseatomske simulacije, kar omogoča doseg za red velikosti večjih krajevnih in časovnih skal. Rezultati te simulacije imajo pomen za uporabo v farmaciji za ciljno dostavo zdravil. V teku pa so tudi že večskalne simulacije biomolekularnih sistemov, kot npr. sistem molekul DNK in protein v večskalnem topilu.

Razvili in objavili pa smo tudi spletno aplikacijo ENZO za obravnavo encimskih katalitskih reakcij.

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

Ni bilo sprememb programa raziskovalnega projekta. V zadnjem letu tudi ni bilo sprememb, povečanja ali zmanjšanja sestave projektne skupine.

7. Najpomembnejši znanstveni rezultati projektne skupine⁶

Znanstveni dosežek			
1.	COBISS ID	4764186	Vir: COBISS.SI
	Naslov	<i>SLO</i>	Problemi statistične fizike v računalniških simulacijah s prilagodljivo resolucijo kompleksnih tekočin
		<i>ANG</i>	Statistical physics problems in adaptive resolution computer simulations of complex fluids
	Opis	<i>SLO</i>	Simuliranje kompleksnih tekočin oziroma v splošnem kompleksnih molekularnih sistemov zahteva modelske pristope, ki pokrivajo širok razpon časovnih in krajevnih skal. Tega ponavadi ne moremo doseči z enim simulacijskim modelom. Preko let so razvili vrsto različnih metod in modelov od dokaj splošnih modelov, ki predvsem opišejo splošne statistične lastnosti npr. polimerov, do vseatomskih modelov ali celo kvantnih pristopov. Medtem ko le-ti dovoljujejo vrsto pomembnih znanstvenih študij, samo kombinacija oziroma bližnja povezava med pristopi na različnih velikostnih skalah dovoljuje resnično kvantitativen opis materialov in procesov. V tem prispevku obravnavamo metodo adaptivne resolucije, v kateri različne krajevne skale obravnavamo v isti simulaciji, pri čemer molekule prosto prehajajo med različnimi domenami, v katerih interagirajo z različnimi interakcijskimi potenciali.
		<i>ANG</i>	Simulating complex fluids or in general complex molecular systems requires approaches covering decades of time and length scales. This usually cannot be achieved within one simulation model. Over the years many different methods and models have been developed ranging from rather generic models, representing most efficiently the universal statistical mechanical properties of e.g. polymers, to all atom models and even quantum mechanical treatments. While these allow for scientifically very important studies in their own right, only a combination and close link between models of different levels allows for a truly quantitative description of materials and processes. In the present contribution we discuss an adaptive resolution approach where different levels of detail are treated within one simulation and the molecules are free to diffuse between different regions in space, where the molecules interact with different interaction potentials.
	Objavljeno v	Plenum Press.; Journal of statistical physics; 2011; Vol. 145, no. 4; 946-966 str.; Impact Factor: 1.397; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 1.271; WoS: UR; Avtorji / Authors: Praprotnik Matej, Poblete Simon, Kremer Kurt	
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek	
2.	COBISS ID	4728090	Vir: COBISS.SI
	Naslov	<i>SLO</i>	ENZO: mrežno orodje za izpeljavo in izračun kinetičnih modelov za encimske katalitske reakcije

		ANG	ENZO: a web tool for derivation and evaluation of kinetic models of enzyme catalyzed reactions
	Opis	SLO	Opisali smo mrežno orodje ENZO, t.j. grafični vmesnik za izgradnjo kinetičnih modelov encimskih katalitskih reakcij. ENZO avtomatično generira pripadajoče diferencialne enačbe iz encimske reakcijske sheme. Te diferencialne enačbe numerično rešimo in neznane koeficiente določimo s prilaganjem k eksperimentalnim podatkom. ENZO dovoljuje hitro ovrednotenje in primerjavo različnih reakcijskih shem. Zato ga lahko uporabljamo za rutinske teste v encimski kinematiki. Prosto dostopen je na http://enzo.cmm.ki.si .
		ANG	We describe a web tool ENZO (Enzyme Kinetics), a graphical interface for building kinetic models of enzyme catalyzed reactions. ENZO automatically generates the corresponding differential equations from a stipulated enzyme reaction scheme. These differential equations are processed by a numerical solver and a regression algorithm which fits the coefficients of differential equations to experimentally observed time course curves. ENZO allows rapid evaluation of rival reaction schemes and can be used for routine tests in enzyme kinetics. It is freely available as a web tool, at http://enzo.cmm.ki.si .
	Objavljeno v		Public Library of Science; PloS one; 2011; Vol. 6, iss. 7; str. e22265; Impact Factor: 4.092; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.096; A': 1; WoS: CU; Avtorji / Authors: Bevc Staš, Konc Janez, Stojan Jure, Hodošek Milan, Penca Matej, Praprotnik Matej, Janežič Dušanka
	Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek
3.	COBISS ID		4329754 Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Sklopitev atomistične in kontinuumske hidrodinamike preko mezoskopskega modela: Uporaba na tekoči vodi
		ANG	Coupling atomistic and continuum hydrodynamics through a mesoscopic model
	Opis	SLO	Izvedli smo triskalno simulacijo tekoče vode, kjer smo istocasno sklopili atomistične, mezoskopske in kontinuumske modele tekočine. Triskalna hidrodinamska metoda za molekularne tekočine omogoča vstavljanje velikih molekul v atomistično domeno preko mezoskopske regije. Nas večskalni pristop je namenjen simulaciji molekulske dinamike odprtih sistemov z relativno velikimi molekulami v bodisi velekanoničnem ansamblu ali pod neravnovesnimi pogoji.
		ANG	We have conducted a triple-scale simulation of liquid water by concurrently coupling atomistic, mesoscopic, and continuum models of the liquid. The triple-scale hydrodynamic solver for molecular liquids enables the insertion of large molecules into the atomistic domain through a mesoscopic region. Our multiscale approach is designed for molecular simulations of open domains with relatively large molecules, either in the grand canonical ensemble or under non-equilibrium conditions.
	Objavljeno v		American Institute of physics; The Journal of chemical physics; 2009; Vol. 131, no. 24; str. 244107-1-244107-6; Impact Factor: 3.093; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.096; A': 1; WoS: UH; Avtorji / Authors: Delgado-Buscalioni Rafael, Kremer Kurt, Praprotnik Matej
	Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek
4.	COBISS ID		4379162 Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Sklopitev različnih stopenj resolucije v molekularnih simulacijah
		ANG	Coupling different levels of resolution in molecular simulations

Opis	SLO	Vpeljali razširitev metode AdResS, ki omogoča spremembo krajevne resolucije med samim potekom molekulske dinamike. Razširitev, ki je osnovana na termodinamskih argumentih, omogoča termodinamsko ravnovesje med molekulami različnih reprezentacij. Robustnost algoritma smo testirali na dveh primerih, t.j., tekočini tetraedričnih molekul in binarni zmesi tetraedričnih in sferičnih molekul.	
	ANG	Simulation schemes for liquids or strongly fluctuating systems that allow to change the molecular representation in a subvolume of the simulation box while preserving the equilibrium with the surroundings introduce conceptual problems of thermodynamic consistency. In this work we present a general scheme based on thermodynamic arguments which ensures a thermodynamic equilibrium among molecules of different representations. The robustness of the algorithm is tested for two examples, namely, an adaptive resolution simulation, atomistic/coarse grained, for a liquid of tetrahedral molecules, and an adaptive resolution simulation of a binary mixture of tetrahedral molecules and spherical solutes.	
Objavljeno v	American Institute of physics; The Journal of chemical physics; 2010; Vol. 132; str. 114101-1-114101-7; Impact Factor: 2.920; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 1.977; A': 1; WoS: UH; Avtorji / Authors: Poblete Simon, Praprotnik Matej, Kremer Kurt, Delle Site Luigi		
Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek		
5.	COBISS ID	4760602	Vir: COBISS.SI
Naslov	SLO	Komentar na "Adaptivno večskalno molekularno dinamiko makromolekularnih tekočin"	
	ANG	Comment on "Adaptive multiscale molecular dynamics of macromolecular fluids"	
Opis	SLO	Pokažemo, da je simulacija molekulske dinamike s spreminjanjem prostostnih stopenj možna le z uporabo termostata.	
	ANG	We show that the MD simulation with fluctuating number of degrees of freedom is feasible only with the application of a thermostat.	
Objavljeno v	American Physical Society.; Physical review letters; 2011; Vol. 107, iss. 9; str. 099801-1-099801-2; Impact Factor: 7.370; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.404; A": 1; A': 1; WoS: UI; Avtorji / Authors: Praprotnik Matej, Poblete Simon, Delle Site Luigi, Kremer Kurt		
Tipologija	1.03 Kratki znanstveni prispevek		

8. Najpomembnejši družbeno-ekonomski rezultati projektne skupine^Z

	Družbeno-ekonomski dosežek		
1.	COBISS ID	4179482	Vir: COBISS.SI
Naslov	SLO	Simulacija molekulske dinamike z adaptivno resolucijo	
	ANG	Adaptive resolution molecular dynamics simulation	
Opis	SLO	Vabljen predavanje na EPSRC Symposium Workshop on Molecular Dynamics. Warwick, Velika Britanija: Univerza v Warwicku, Matematični inštitut, Junij 1-5, 2009.	
	ANG	Invited talk presented at EPSRC Symposium Workshop on Molecular Dynamics. Warwick, United Kingdom: University of Warwick, Mathematics Institute, June 1-5, 2009.	
Šifra	B.04 Vabljen predavanje		
Objavljeno v	University of Warwick, Mathematics Institute; 2009; Avtorji / Authors: Praprotnik Matej		

	Tipologija	3.16 Vabljen predavanje na konferenci brez natisa	
2.	COBISS ID	4446746	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	AdResS: istočasna sklopitev različnih stopenj resolucije v molekularnih simulacijah.
		ANG	AdResS : concurrent coupling of different levels of resolution in molecular simulations
	Opis	SLO	Vabljen predavanje na mednarodni konferenci "Multiscale molecular modelling. Edinburg, Velika Britanija, Junij 30-Julij 3 2010."
		ANG	Invited lecture at "Multiscale molecular modelling. Edinburg, UK, June 30-July 3 2010."
	Šifra	B.04 Vabljen predavanje	
	Objavljeno v	2010; Avtorji / Authors: Praprotnik Matej	
	Tipologija	3.16 Vabljen predavanje na konferenci brez natisa	
3.	COBISS ID	4514586	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Povezava atomistične in kontinuumske hidrodinamike
		ANG	Linking atomistic and continuum hydrodynamics
	Opis	SLO	Vabljen predavanje na "International workshop: Novel simulation approaches to soft matter systems. Dresden, 20-24 September 2010."
		ANG	Invited lecture at "International workshop: Novel simulation approaches to soft matter systems. Dresden, 20-24 September 2010."
	Šifra	B.04 Vabljen predavanje	
	Objavljeno v	2010; Avtorji / Authors: Praprotnik Matej	
	Tipologija	3.16 Vabljen predavanje na konferenci brez natisa	
4.	COBISS ID	4651546	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Večskalne simulacijske metode za tekočine
		ANG	Multiscale simulation methods for liquids
	Opis	SLO	Vabljen predavanje na 3rd Edinburgh-Cambridge Workshop, Univerza Cambridge, Department of chemistry, Cambridge, 26. April, 2011
		ANG	Invited lecture on 3rd Edinburgh-Cambridge Workshop, University of Cambridge, Department of chemistry, Cambridge, 26th April, 2011
	Šifra	B.04 Vabljen predavanje	
	Objavljeno v	Kemijski inštitut; 2011; Avtorji / Authors: Praprotnik Matej	
	Tipologija	3.16 Vabljen predavanje na konferenci brez natisa	
5.	COBISS ID	4648730	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Večskalne simulacije tekočin
		ANG	Multiscale simulations of fluids
	Opis	SLO	Vabljen predavanje na INRIA, Grenoble, Francija.
		ANG	Invited talk at INRIA (Institut national de recherche en informatique et en automatique), 20. april 2011, Grenoble, France.
	Šifra	B.04 Vabljen predavanje	
	Objavljeno v	Institut national de recherche en informatique et en automatique; 2011; Avtorji / Authors: Praprotnik Matej	
	Tipologija	3.14 Predavanje na tuji univerzi	

9. Drugi pomembni rezultati projektne skupine⁸

1. Doc. dr. Matej Praprotnik je bil v letih 2009-2010 6 mesecev akademski gost na Chair of Computational Science, ETH Zurich, Zurich, Švica.
2. Doc. dr. Matej Praprotnik je prejel nagrado za najboljši prispevek "Triple-scale simulation of liquid water" na 3rd Monte Verita Conference on Multiscale Modeling Materials: Unsolved Problems and Challenges, 4- 9.9.2009, Ascona, Švica.
3. Doc. Dr. Matej Praprotnik je bil ocenjevalec projekta za Swiss National Science Foundation (SNSF).
4. Doc. Dr. Matej Praprotnik je bil ocenjevalec projekta za ETH Zurich Research Commission, Švica.
5. Doc. Dr. Matej Praprotnik je postal član izvršilnega odbora Društva biofizikov Slovenije.
6. Staš Bevc je postal uradni razvijalec programskega paketa Espresso++ za simulacije mehke snovi.

10. Pomen raziskovalnih rezultatov projektne skupine⁹

10.1. Pomen za razvoj znanosti¹⁰

SLO

Povezava med atomsko strukturo in materialnimi lastnostmi in funkcijo je osnovnega pomena za moderno znanost mehke snovi. To zahteva globoko razumevanje obilice krajevnih (in časovnih skal), od atomskih do makroskopskih. Na tej točki igrajo računalniške simulacije vse pomembnejšo, če ne celo vodilno vlogo. Tradicionalno delimo simulacije v dve glavni skupini, namreč na poenostavljene modele, ki opišejo splošne vidike molekularnih sistemov in na simulacije, ki uporabljajo klasična polja sil z vsemi atomskimi podrobnostmi. Še vedno pa ne moremo obravnavati problemov, ki zahtevajo ogromne sisteme in/ali dolge karakteristične časovne skale v kombinaciji s kemično specifičnimi modeli, s posameznimi metodami iz ene ali druge skupine. Z razvojem večskalnih metod pa različne pristope združimo v močno orodje, ki znatno pohitri računalniške simulacije. To nam omogoča doseg eksperimentalnih časovnih in krajevnih skal z uporabo računalniške simulacije. Pomen novo razvitih numeričnih pristopov za razvoj znanosti pa se kaže tudi v veliki odmevnosti objavljenih del, kar je razvidno iz velikega števila citatov in vabljenih predavanj na mednarodnih konferencah v zdanjih letih.

ANG

The relation between atomistic structure and material properties and function is a basic concern of modern soft matter science. This implies a thorough understanding on many length and correspondingly time scales ranging from atomic to macroscopic. At this point computer simulations are playing an increasingly important, if not the central role. Traditionally simulations have been separated in two main groups, namely, into simplified models to deal with generic or universal aspects of molecular systems and those employing classical force field simulations with all atomistic detail. Still characteristic problems, which require huge systems and/or long times in combination with a chemistry specific model, cannot be tackled by these methods alone. More recently with the development of scale-bridging or multiscale simulation techniques, these different approaches have been combined into an emerging rather powerful tool, which will enable us to reach the experimental length and time scales using computer simulation.

10.2. Pomen za razvoj Slovenije¹¹

SLO

Cilj projekta je bil razvoj, izboljšava in analiza numeričnih metod za večskalne simulacije mehke snovi in molekularnih tekočin. Pomemben del projekta je tudi to, da nam je s tem omogočeno sodelovanje z vodilnimi laboratoriji v svetu na tem področju.

Z znanstvenimi rezultati tega projekta smo v Slovenijo kot prvi uvedli večskalne simulacije

molekulske dinamike mehke snovi in molekularnih tekočin. Večskalno modeliranje in simulacije so izredno aktualno področje znotraj računske fizike/kemije. Zato je udejstvovanje slovenskih raziskovalcev na tem področju, kar je ta projekt omogočil, velikega pomena za razvoj slovenske znanosti.

Razvite metode uporabljamo tudi v pedagoške namene in popularizacijo raziskovalnega in študijskega področja.

Rezultate raziskav smo objavili v mednarodnih znanstvenih revijah in jih predstavili na mednarodnih in domačih znanstvenih konferencah. Člani projektne skupine so bili tudi mentorji/somentorji pri različnih doktorskih disertacijah s področij: fizika, računalništvo, farmacija in kemija.

Pri raziskavah, ki jih izvajamo v okviru našega raziskovalnega dela, razvijamo in uporabljamo metode molekularnega modeliranja, s katerimi imamo veliko dobrih izkušenj in dobrih rezultatov. Izgradili smo tudi več računalniških sistemov imenovanih VRANA. VRANA je kratica za Vzpostavljeni Računalnik za Akceleracijo Numeričnih Algoritmov. To so multiračunalniški sistemi sestavljeni iz osebnih računalnikov povezanih s hitro vzpostavno mrežo. Te računalniške sisteme uporabljajo poleg članov naše programske skupine tudi kolegi iz drugih programskih skupin in laboratorijev na Kemijskem inštitutu in tudi kolegi iz drugih inštitucij, kot npr. iz Inštituta Jožef Stefan, Medicinske fakultete, Fakultete za matematiko in fiziko, Biotehnične fakultete, Fakultete za farmacijo, Fakultete za računalništvo in informatiko in drugih. Na teh računalniških sistemih opravimo tudi obveznosti, ki so vezane na računalniško modeliranje in drugo računanje vezano na pogodbe z industrijo, npr. Lek, Krka in druge. Nadalje, poleg zgoraj naštetega, vsakemu od izvajalcev in uporabnikov nudimo dodatno asistenco, ki je vezana od pomoči pri inštalaciji in uporabi programov za molekularno modeliranje do inštalacije računalnikov in skrbi za lokalno računalniško mrežo in drugo.

ANG

The purpose of the project was to develop, improve, and apply the multiscale methods for molecular dynamics simulations in the study of biologically and technologically relevant soft matter systems. The project focused on specific problems in the research area, on code development and application. An important component of the project will involve close collaboration with the leading laboratories in this research field. We collaborate also with groups from the IJS, MF, FMF, BF, FF, FRI (UL), PU.

We have introduced a field of multiscale molecular dynamics simulation of soft matter and molecular liquids to Slovenia. The multiscale modeling and simulation is a very hot topic within computational physics/chemistry. The active participation of slovenian researchers in this field, which was made possible by this project, is therefore of an importance for the development of computational science in Slovenia.

Newly developed methods for computer simulations of soft matter and molecular liquids are used to teaching and science popularization. Members of project team also supervised several graduate students in the field of physics, computer science, pharmacy and chemistry.

The results of this research were published in international scientific journals and were presented at international scientific meetings.

With our scientific quality and other international activity, i.e., invited lectures at scientific meetings and collaborations with top international groups in the field we increase our country's international recognition as well as sustain and enhance its national identity.

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"/>	
G.02.04.	Zmanjšanje porabe materialov in energije	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.05.	Razširitev področja dejavnosti	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.06.	Večja konkurenčna sposobnost	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.07.	Večji delež izvoza	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.08.	Povečanje dobička	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.09.	Nova delovna mesta	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.10.	Dvig izobrazbene strukture zaposlenih	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.11.	Nov investicijski zagon	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.12.	Drugo: <input type="text"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
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="text"/>	<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="text"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.05.	Ohranjanje in razvoj nacionalne naravne in kulturne dediščine in	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	

	identitete					
G.06.	Varovanje okolja in trajnostni razvoj	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.07	Razvoj družbene infrastrukture					
G.07.01.	Informacijsko-komunikacijska infrastruktura	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.07.02.	Prometna infrastruktura	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.07.03.	Energetska infrastruktura	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.07.04.	Drugo:	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.08.	Varovanje zdravja in razvoj zdravstvenega varstva	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.09.	Drugo:	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	

Komentar

--

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**

Kot prvi na svetu smo s sodelavci iz ETH Zurich izvedli večskalno simulacijo toka vode mimo molekule fullerena s polno 3D sklopitvijo med mikro in makroskopskim opisom tekočine. Uporabili smo Schwarzovo metodo, ki sklaplja simulacijo molekulske dinamike (MD) tekoče vode okrog C540 molekule z Lattice-Boltzmann (LB) opisom Navier-Stokesovih enačb. Predstavljena metoda implicitno ohranja toka mase in gibalne količine in premošča algoritme osnovane na ohranitvi tokov in prekrivalne algoritme Schwarzovega tipa. Novi pristop uporabimo za določitev robnih pogojev na površini molekule fullerena. Z našim večskalnim pristopom lahko simuliramo tekočinske tokove okrog nanoobjektov, kar je izrednega pomena za hidrodinamiko v ograjenih geometrijah (npr. ciljni dostavi zdravil), kjer robni pogoji znatno vplivajo na tekočinski tok. Članek je bil objavljen v: J. comput. phys., 2012, vol. 231, iss. 7, str. 2677-2681.

14.2. Izjemni družbeno-ekonomski dosežek

Doc. Dr. Matej Praprotnik je bil 2 meseca član "The Kavli Institute for Theoretical Physics (KITP), University of California, Santa Barbara, ZDA" na programu "Physical Principles of Multiscale Modeling, Analysis and Simulation in Soft Condensed Matter". KITP je prestižni raziskovalni inštitut na University of California, Santa Barbara. Je eden izmed vodilnih inštitutov za teoretično fiziko na svetu. Programi, ki jih organizira, združujejo teoretične fizike v skupinskem delu na temah, ki so v samem vrhu teoretične znanosti. Financiran je pretežno preko The National Science Foundation odkar je bil ustanovljen kot the Institute for Theoretical Physics v 1979. V članku iz 2007 objavljenem v Proceedings of the National Academy of Science so KITP uvrstili na prvo mesto po vplivu pri primerjavi nebiomedicinskih raziskovalnih ustanov v ZDA.

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:

Kemijski inštitut

Matej Praprotnik

ŽIG

Kraj in datum:

Oznaka prijave: ARRS-RPROJ-ZP-2013/98

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.rrs.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

24-D7-AC-3A-94-D4-5E-AE-92-DA-32-9B-09-40-29-0D-A3-D0-15-6F

