

Oznaka poročila: ARRS-RPROG-ZP-2015/13



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	P1-0201
Naslov programa	Fizikalna kemija Physical Chemistry
Vodja programa	2563 Vojeslav Vlachy
Obseg raziskovalnih ur (vključno s povečanjem financiranja v letu 2014)	35475
Cenovni razred	
Trajanje programa	01.2009 - 12.2014
Izvajalci raziskovalnega programa (javne raziskovalne organizacije - JRO in/ali RO s koncesijo)	103 Univerza v Ljubljani, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo
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

Proučevali smo fizikalno-kemijske lastnosti raztopin. Največ časa smo posvetili vodnim

raztopinam elektrolitov, površinsko aktivnih snovi, polielektrolitov (tako sintetskih kot tudi bioloških), ionskim tekočinam, ter drugim sorodnim temam. Pri tem smo uporabljali moderne eksperimentalne in teoretične tehnike. Med merskimi metodami so to SANS, SAXS, DLS, kalorimetrija, DSC, konduktometrija in druge. Med teoretičnimi metodami so to računalniške simulacije (Monte Carlo in MD) ter termodinamske perturbacijske teorije, ter integralske enačbe primerne za študij asociirajočih fluidov. Sodelovali smo z mnogimi laboratoriji po svetu, tako v Evropi (Francija, Ukrajina, Rusija, Nemčija, Finska, ...) kot v ZDA in Mehiki. Rezultati našega dela so zbrani v okoli 180 člankih, objavljenih v uglednih revijah (med drugimi tudi nekaj v JACS-u in enega v Angew. Chem. Int. Ed.) in mnogih kongresnih poročilih ali v obliki predavanj, doma predvsem pa v tujini.

ANG

The main subject of our work were physico-chemical properties of solutions. The emphasize was on solutions of electrolytes, surfactants, polyelectrolytes (both synthetic as bio-polyelectrolytes), ionic liquids, and similar. For this purpose we used modern experimental and theoretical techniques of physical chemistry. Among experimental techniques we used SANS, small angle x-ray, DLS, calorimetry, DSC, conductometry, etc and as theoretical tools we used computer simulations (Monte Carlo and MD) and thermodynamic perturbation and integral equation techniques suitable for associative systems. We collaborated with research groups in Europe (France, Ukraine, Russia, Germany, Finland, etc) and USA and Mexico. The results of our group are collected in around 180 scientific papers published in distinguished journals (including several in JACS, and one in Angew. Chem. Int. Ed.) and many conference reports or lectures in foreign institutions or conferences.

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

i) Proučevali smo transportne lastnosti in asociacijo ionov v vodnih raztopinah različnih simetričnih elektrolitov (zdravilnih učinkovin, umetnih sladil ter drugih biološko pomembnih elektrolitov). Izkazalo se je, da je v vodnih raztopinah alkalijskih halogenidov asociacija ionov v tesni korelaciji s prosto entalpijo hidratacije teh ionov, kar smo potrdili tudi z računalniškimi simulacijami (1643567). Študirali smo tudi asociacijo ionov v razredčenih raztopinah ionskih tekočin v različnih topilih. Ugotovili smo, da ionske tekočine kažejo praktično enake lastnosti kot »običajni« elektroliti, kjer so te odvisne od velikosti ionov in lastnosti topila (35344389). Sistematično smo proučili tudi vodne raztopine modelnega nesimetričnega elektrolita (36628997). Izvedli smo termodinamične in strukturne raziskave micelnih sistemov kationskih surfaktantov v vodnih raztopinah različnih večinoma farmacevtsko pomembnih anionov (**dosežek 5**, 36016389). Rezultati kažejo, da lahko micelizacija služi za študij ionospecifičnih efektov (5292570). Temeljne raziskave koloidnih sistemov smo razširili na farmacevtsko in tehnološko pomembne sisteme, da bi napovedali najprimernejše sestave za sproščanje (3440753) in kristalizacijo (36344837) zdravilnih učinkovin ali tvorbe nanovlaken (3362417). S termodinamično analizo smo sodelovali pri raziskavah selektivnega vezanja ATP-kompetitivnih inhibitorjev nekaterih novih bakterijskih encimov (5274906).

ii) Določili smo fazni diagram in strukture v širokem področju sestav za mešanice anionskega polielektrolita, kationskega surfaktanta in vode (36006917). Ugotovili smo, da na strukture in fazna ravnotežja mešanic vplivata hidrofobni značaj surfaktanta in poliiona. Obširen pregled obnašanja teh mešanic je podan v preglednem članku (**dosežek 1**, 34100741). Raziskave strukturnih lastnosti koloidnih sistemov smo razširili na vodne raztopine ataktične in izotaktične polimetakrilne kisline. Pokazali smo, da je agregacija obeh kislin odvisna od deleža nevtraliziranih karboksilnih skupin, stereoregularnosti poliiona ter vrste in koncentracije dodanega elektrolita (1675823).

iii) Z raziskavami vodnih raztopin biopolimerov smo pokazali na sposobnost povezave termodinamične in kinetične analize procesov s strukturnimi in funkcionalnimi značilnostmi DNK in proteinov. To nam je omogočilo reševanje bazičnih problemov, kot so: zvitje nukleinskih kislin v strukture imenovane G-kvadrupleksi (npr. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2014** naslovnica, *J. Am. Chem. Soc.* **2012, 2008**), zvitje in vezava nativno nestrukturiranih proteinov (*J. Am. Chem. Soc.* **2013**), interakcije protein-protein in protein-DNK povezane z regulacijo delovanja bakterijskih modulov toksinantitoksin (*J. Biol. Chem.* **2009**), druge biološko pomembne interakcije in reševanje industrijske problematike (*J. Biol. Chem.* **2012**). ARRS je dela na področju fizikalne kemije biopolimerov dvakrat izbrala kot izjemni raziskovalni dosežek na področju kemije. Dela so v tem poročilu opisana kot **dosežki 2** in **4**.

iv) Proučevali smo lastnosti sistemov delcev, ki interagirajo s potencialom z dvema karakterističnima dolžinama in pokazali, da imajo vodi podobne lastnosti ([1622831](#)). Za krogelno simetrične modele vode smo proučili vpliv diskretnosti topila na lastnosti raztopin elektrolita ([1661743](#), [36411653](#), [34867205](#)). Z enostavnim modelom vode smo razložili ionospecifične vplive na izsoljevanje hidrofobnih molekul ([30286597](#), [34600453](#)) ter topnost alkalijskih halogenidov ([1643567](#)). Merili smo termodinamične in transportne lastnosti kationskih polielektrolitov (ionenov) z različnimi gostotami naboja in različnimi protiioni. Pokazali smo, da so razredčilne entalpije ([34960645](#), [36662021](#)), toplote mešanja ([35707397](#), [35925509](#)) in transportna števila ([36602373](#), [34322949](#)) močno odvisni od vrste protiiona ter hidrofobnosti poliiiona ([30525189](#), [33345541](#), [36222725](#)). Dognanja smo potrdili z računalniškimi simulacijami ([33328645](#), [36050437](#)). Najbolj citiran članek (**dosežek 3**, [30430213](#)) ima 81 neodvisnih citatov. Študirali smo lastnosti ionov v nabiti mikroporozni snovi ([36498181](#), [36230149](#), [35680773](#)). Pomembnejše rezultate s tega področja smo na povabilo urednikov *Ann. Rep. Prog. Chem. Sec. C* objavili v preglednem članku ([35086853](#)). Modelirali smo difuzijo glukoze v možganskih celicah ([36617477](#)).

v) S simulacijo Monte Carlo (MC) ter Ornstein-Zernik-ovo integralsko enačbo smo proučevali modelne koloidne disperzije ([30282245](#), [30270469](#), [33367045](#)). Razvili smo metodo za izračun ozkokočnega rentgenskega sipanja (SAXS) modelnih sistemov ([34580741](#)) in v kombinaciji z MC simulacijami raziskali strukturo preprostih organskih tekočin ([30218501](#), [30848005](#), [36184325](#), [34490373](#), [35714053](#)). Rezultati so osvetlili povezavo med mikroskopsko in mezoskopsko strukturo molekularnih raztopin. S tehniko SAXS smo raziskali tudi več biološko relevantnih koloidnih sistemov ([30847749](#), [30285829](#), [33271301](#), [36188165](#), [36573957](#), [4362104](#)). Raziskovali smo tudi hierarhično strukturirane sisteme na osnovi monogliceridov, ki predstavljajo osnovo za vrsto novih funkcionalnih materialov ([34569221](#), [33271557](#), [30204933](#), [35498245](#), [1671727](#)).

vi) Metode molekulskega sidranja in fluorescenčne meritve so pokazale, da se od raziskanih polifenolov na goveji serumski albumin najboljše veže EGCG ([4113784](#)). Sintetizirali smo serijo inhibitorjev toksina kolere z dvojnimi prijemališčem in delovanje preverili z metodo afinitetne kromatografije ([33990661](#)). Modelirali smo interakcijo inhibitorjev s kinazo TrkB, ki je pomembna za pravilno delovanje živčnega sistema. Ugotovili smo, da je za uspešno obravnavo potrebno upoštevati tako aktivno kot neaktivno obliko kinaze ([34621701](#)).

vii) Raziskali smo transportne in termodinamične lastnosti raztopin alkalijskih soli poli(tiofen-3-il očetne kisline) ([36187397](#)) in opozorili na problem staranja teh raztopin ([36187141](#)).

viii) V dveh člankih, objavljenih v *J. Phys. Chem. C* (27359015, 27358759), smo raziskali vpliv geometrije površine bakra na adsorpcijo benzotriazola in klora.

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

SLO

Program združuje raziskovalce Katedre za fizikalno kemijo, FKKT, UL. Skupina trenutno šteje 16 doktorjev znanosti in 6 MR in je financirana s 3,25 FTE. V zadnjih 5 letih smo objavili 173 člankov in v gornjem poročilu zaradi omejitev prostora navajamo samo nekatere najpomembnejše. Obseg in kvaliteta dela kažeta, da je skupina krepko preseгла zastavljene cilje.

Glavna področja našega dela so: i) površinsko aktivne snovi in njihove interakcije z drugimi molekulami v raztopini (tudi kompleksacija s polielektroliti), ii) raztopine biopolimerov (predvsem G-kvadrupleksov in proteinov), iii) raztopine polielektrolitov, ki vsebujejo hidrofobne skupine ter njihova interakcija z različnimi ligandi, iv) študij lastnosti zdravilnih učinkovin, umetnih sladil in drugih farmacevtsko pomembnih elektrolitov ter surfaktantov, v) raziskave koloidov in hierarhično strukturiranih sistemov na osnovi monogliceridov s pomočjo sipanja rentgenskih žarkov, vi) razvoj teorije na osnovi integralnih enačb za molekule, med katerimi delujejo usmerjene sile (na primer voda, surfaktanti, ionske tekočine). Uporaba te teorije za študij hidrofobnih in ionskih interakcij ter obarjanje proteinov. vii) Teoretične raziskave dinamike in termodinamike molekul v nabitih mikroporoznih sistemih. Predstavljene raziskave bogatijo osnovno znanje na področju fizikalne kemije raztopin, koloidnih disperzij ter površinskih pojavov. Vodne raztopine elektrolitov in (bio)polielektrolitov imajo pomembno mesto v znanosti in tehnologiji. Ioni (preprosti in sestavljeni) sodelujejo v pomembnih procesih v našem telesu. Voda igra pri tem pomembno vlogo, ki še zdaleč ni v celoti razumljena. Poleg tega voda tudi v industriji vedno bolj nadomešča ekološko manj sprejemljiva topila. Eksperimentalne raziskave dopolnjujemo s teoretičnimi (metoda Monte Carlo, dinamika molekul, integralne enačbe, kvantno mehanski računi); namen našega dela je razumevanje lastnosti snovi na molekularnem nivoju. Članke objavljamo v najuglednejših revijah s tega področja, kot so *JACS*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, *Nucleic Acid Research*, *Advances in Colloid and Interface Science*, *PCCP*, *J. Phys. Chem. B*, *Langmuir*, *J. Chem. Phys.* in druge.

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

SLO

Sprememb ni bilo.

6. Najpomembnejši znanstveni rezultati programske skupine⁵

		Znanstveni dosežek	
1.	COBISS ID	34100741	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Asociacija in tvorba urejenih struktur v mešanicah nasprotno nabitih polielektrolitov in surfaktantov
		ANG	Association and structure formation in oppositely charged polyelectrolyte-surfactant mixtures
			V tem članku, ki je bil napisan na povabilo urednika revije z visokim faktorjem vpliva (8,651), obravnavamo asociacijo in nastanek urejenih struktur v mešanicah vinilnih anionskih polielektrolitov in kationskih

	Opis	SLO	surfaktantov. Na več primerih pokažemo, da so lastnosti polielektrolita, ki igrajo odločilno vlogo pri interakciji med komponentami in tvorbi tekoče kristalnih struktur (kompleksov), gostota naboja, togost verige, njena stereoregularna struktura (taktičnost), in prisotnost hidrofobnih stranskih skupin na poliionu. Predstavljene so razne termodinamične in transportne lastnosti kompleksov med poliioni in surfaktanti.		
		ANG	In this paper, written upon editor's invitation in a journal with high impact factor (8.651), association and formation of ordered structures in mixtures of vinyl polyelectrolytes and cationic surfactants is treated. It is demonstrated that polyion charge density, rigidity, its stereoregular structure (tacticity), and eventual presence of hydrophobic groups play a decisive role in interactions and formation of liquid crystalline structures. Various thermodynamic and transport properties of polyionsurfactant ion complexes are presented.		
	Objavljeno v	Elsevier Pub. Co.; Advances in colloid and interface science; 2010; Vol. 158, no. 1/2; str. 68-83; Impact Factor: 8.651;Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 3.161; A'': 1;A': 1; WoS: EI; Avtorji / Authors: Kogej Ksenija			
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek			
2.	COBISS ID	36015365	Vir: COBISS.SI		
	Naslov	SLO	Osnove termodinamike zvitja človeške telomerne DNK v strukturo G-kvadrupleksov		
		ANG	Energetic basis of human telomeric DNK folding into G-quadruplex structures		
	Opis	SLO	Napredek v razumevanju nekaterih pomembnih celičnih procesov je precej počasen zaradi pomanjkanja znanja o silah, ki vodijo zvitje G-kvadrupleksnih struktur v DNK zaporedjih bogatih z gvanini. V predstavljenem delu smo izvedli globalno termodinamično analizo kalorimetričnih in spektroskopskih podatkov pridobljenih z opazovanjem zvitja/razvitja človeške telomerne DNK povzročene s spremembo temperature in/ali koncentracije soli. Pokazali smo, da lahko razvitje človeške telomerne DNK opišemo kot ravnotežen monomolekularen proces, ki vključuje tri termodinamično razločljiva stanja: zvito, vmesno in razvito. Naši rezultati predstavljajo prvo eksperimentalno potrditev mehanizma zvitja človeške telomerne DNK, ki vključuje več stabilnih makroskopskih stanj, predlaganega na osnovi teorijskih raziskav.		
		ANG	Progress in understanding the molecular basis of some important cellular processes is rather slow due to the lack of knowledge of forces that drive folding of G-quadruplex structures in guaninerich DNA sequences. In the current work, we performed a comprehensive global thermodynamic analysis of calorimetric and spectroscopic data obtained on monitoring the folding/unfolding of human telomeric DNA induced by changes of temperature and/or salt concentration. We show that unfolding of human telomeric DNA may be described as a monomolecular equilibrium process that involves thermodynamically distinguishable folded, intermediate, and unfolded state. Our results represent the first experimental support of the theoretically predicted sequential unfolding/folding mechanism of human telomeric DNA.		
Objavljeno v	American Chemical Society; Journal of the American Chemical Society; 2012; Vol. 134, no. 23; str. 9657-9663; Impact Factor: 10.677;Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 3.175; A'': 1;A': 1; WoS: DY; Avtorji / Authors: Bončina Matjaž, Lah Jurij, Prislan Iztok, Vesnaver Gorazd				
Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek				

3.	COBISS ID		30430213	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Tvorba ionskih parov pri simulaciji raztopin alkalijskih halogenidov	
		ANG	Ion pairing in molecular simulations of aqueous alkali halide solutions	
	Opis	SLO	S pomočjo dinamike molekul smo raziskali korelacije med ioni za različne modele vode. Izračunali smo potencial povprečne sile za vse kombinacije soli, ki jih dajo ioni 1. in 7. skupine periodnega sistema. Poleg tega smo izračunali ravnotežne konstante za asociacijo in jih primerjali s poskusi. Iz primerjave potencialov povprečne sile smo ugotovili, da Collinsova hipoteza v našem primeru velja: dva majhna iona (kation in anion) in dva velika iona bosta v vodi z veliko verjetnostjo tvorila kontaktni par, medtem ko dva različno velika iona povezujejo molekule vode.	
		ANG	Using molecular dynamics simulations, we study ion-ion correlations in water. We study the potentials of mean force for the full set of alkali halide ion pairs, and we test different parameter sets for modeling the water and the ions. We also calculate association equilibrium constants and compare them to experiments. From observations on the relative depths of the free energies of the contact and the solventshared ion pair, we find a good correlation with Collins proposition: two small and two large ions should associate in water, and small-large combination of ions should be more dissociated.	
	Objavljeno v	American Chemical Society; The journal of physical chemistry. B, Condensed matter, materials, surfaces, interfaces & biophysical; 2009; Vol. 113, no. 19; str. 6782-6791; Impact Factor: 3.471; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.855; WoS: EI; Avtorji / Authors: Fennell Christopher J., Bizjak Alan, Vlachy Vojko, Dill Ken A.		
Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek			
4.	COBISS ID		1701423	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Nova pot zvitja DNK v G-kvadrupleks	
		ANG	A new pathway of DNA G-quadruplex formation	
	Opis	SLO	Opazili smo nov intermediat (i-Oxy-1.5) pri zvitju Oxy-1.5 DNK iz telomerne regije organizma <i>Oxytricha nova</i> v G-kvadrupleks. Identificirali smo ga v vodni raztopini z uporabo NMR spektroskopije, gelske elektroforeze, diferenčnih absorpcijskih spektrov, CD spektroskopije in diferenčne dinamične kalorimetrije. Kinetična analiza s kalijevim ionom induciranih strukturnih prehodov kaže, da je zvitje Oxy-1.5 G-kvadrupleksa iz intermediata i-Oxy-1.5 veliko hitrejše in poteče preko manjšega števila vmesnih stanj kot zvitje iz popolnoma razvite verige DNK. Zato smo predlagali novo pot zvitja DNK v G-kvadrupleks. Ta študija kaže, da lahko z gvaninom bogata DNK zaporedja obstajajo v predorganiziranih strukturah DNK, ki imajo veliko težnjo po zvitju v G-kvadrupleks ob prisotnosti kationov, kot so kalijeji.	
		ANG	A new folding intermediate (i-Oxy-1.5) of <i>Oxytricha nova</i> telomeric Oxy-1.5 G-quadruplex was characterized in aqueous solution using NMR spectroscopy, native gel electrophoresis, thermal differential spectra (TDS), CD spectroscopy, and differential scanning calorimetry (DSC). Kinetic analysis of potassium ion-induced structural transitions shows that folding of Oxy-1.5 G-quadruplex from i-Oxy-1.5 is much faster and proceeds through less intermediates than folding from single strands. Therefore, a new folding pathway of Oxy-1.5 G-quadruplex is proposed. This study provides evidence that guaninerich DNA sequences can self-assemble into specific preorganized DNA structures that are predisposed to fold into G-quadruplex when interacting with cations such as potassium ions.	
		Wiley-VCH; Angewandte Chemie; 2014; Vol. 53, issue 19; str. 4881-4884;		

	Objavljeno v	Impact Factor: 11.336; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 3.395; A'': 1; A': 1; WoS: DY; Avtorji / Authors: Čeru Slavko, Šket Primož, Prislan Iztok, Lah Jurij, Plavec Janez	
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek	
5.	COBISS ID	36016389	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Termodinamična raziskava micelizacije 3-[(3-holamidopropil)-dimetilamonijevega]-1-propan sulfonata (CHAPS) z uporabo izotermne titracijske kalorimeterije: vpliv temperature, soli in pH
		ANG	Thermodynamic characterization of CHAPS micellization using isothermal titration calorimetry
	Opis	SLO	Proučevali smo vpliv različnih anionov in kationov na micelizacijo biokompatibilnega zwitterionskega surfaktanta CHAPS v vodnih raztopinah LiCl, CsCl, NaBr, NaI in različnih pufov. Izkazalo se je, da se CHAPS v vodi in pufrih obnaša kot neionski, v raztopinah soli pa kot kationski surfaktant s šibkim nabojem micel. S pomočjo modelne enačbe na osnovi »mass action« modela smo določili vse termodinamične parametre micelizacije ter ugotovili, da je agregacijsko število izredno nizko (~ 5). Iz zveze med spremembo toplotne kapacitete pri micelizaciji in razliko med topilo dostopno površino pred in po micelizaciji lahko sklepamo tudi na delno hidratacijo notranjosti micel. To pomeni, da lahko micelizacijo CHAPS primerjamo z micelizacijo kationskih surfaktantov s kratko alkilno verigo.
		ANG	The effect of different cations and anions on the micellization of a biocompatible zwitterionic surfactant CHAPS has been examined in water, LiCl, CsCl, NaBr, and NaI aqueous and buffer solutions. It turned out that CHAPS behaves as a weakly charged cationic surfactant in salt solutions and as a nonionic surfactant in water and buffer medium. All thermodynamic parameters of micellization were estimated by fitting the model equation based on the mass action model to the experimental data. The aggregation numbers of CHAPS surfactant around critical micelle concentration, obtained by the fitting procedure, are considerably low (~ 5). Furthermore, some predictions about the hydration of the micelle interior based on the correlation between heat capacity change and changes in solvent accessible surface upon micellization were made. CHAPS molecules are believed to stay in contact with water upon aggregation, which is somehow similar to the micellization of short alkyl chain cationic surfactants.
	Objavljeno v	American Chemical Society; Langmuir; 2012; Vol. 28, no. 28; str. 10363-10371; Impact Factor: 4.187; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.402; A': 1; WoS: DY, EI, PM; Avtorji / Authors: Kroflič Ana, Šarac Bojan, Bešter-Rogač Marija	
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek	

7. Najpomembnejši družbeno-ekonomski rezultati programske skupine⁶

	Družbeno-ekonomski dosežek		
1.	COBISS ID	34006533	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Ionske raztopine: od Debye-Huckelove teorije do ionospecifičnih vplivov
		ANG	Ions in water: from Debye-Huckel limiting law to the ion-specific effects
	Opis	SLO	Šest ur predavanj za podiplomske študente na Kalifornijski univerzi v

		San Franciscu (ZDA); 3.2. 4.2.2010
	ANG	Short (6 hours) course for graduate students at University of California San Francisco (USA); 3.2. 4.2.2010.
	Šifra	B.05 Gostujoči profesor na inštitutu/univerzi
	Objavljeno v	2010; Avtorji / Authors: Vlachy Vojko
	Tipologija	3.14 Predavanje na tuji univerzi
2.	COBISS ID	34916101 Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO Zoisovo priznanje za pomembne dosežke v fizikalni kemiji
		ANG Zois award for scientific achievements in the field of physical chemistry
	Opis	SLO A. Jamnik je dobitnik priznanja, ki ga je podelilo Ministrstvo za visoko šolstvo, znanost in tehnologijo 23. novembra 2010 (Ljubljana).
		ANG A. Jamnik was awarded by the Ministry of Science and Higher Education of Republic of Slovenia on November 23rd, 2010 (Ljubljana).
	Šifra	E.01 Domače nagrade
	Objavljeno v	Ministrstvo za visoko šolstvo, znanost in tehnologijo; 2010; Avtorji / Authors: Jamnik Andrej
	Tipologija	3.25 Druga izvedena dela
3.	COBISS ID	30369029 Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO Članstvo v Evropski akademiji znanosti in umetnosti
		ANG Active member of European Academy of Science and Arts
	Opis	SLO V. Vlachy je bil leta 2009 izvoljen za rednega člana Evropske akademije znanosti in umetnosti (EASA) s sedežem v Salzburgu.
		ANG V. Vlachy was in the year 2009 elected a member of the European Academy of Sciences and Arts (Salzburg).
	Šifra	E.02 Mednarodne nagrade
	Objavljeno v	2009; Avtorji / Authors: Vlachy Vojko
	Tipologija	3.25 Druga izvedena dela
4.	COBISS ID	15382277 Vir: vpis v poročilo
	Naslov	SLO Journal of Molecular Liquids. BešterRogač, Marija je članica uredniškega odbora 2008, gostujoča urednica 2007. [Print ed.]. Amsterdam: Elsevier. ISSN 01677322.
		ANG Journal of Molecular Liquids. BešterRogač, Marija (member of the editorial board 2008, editor of the special issue 2007). [Print ed.]. Amsterdam: Elsevier. ISSN 01677322.
	Opis	SLO BešterRogač, Marija je članica uredniškega odbora 2008, gostujoča urednica 2007. [Print ed.]. Amsterdam: Elsevier. ISSN 01677322.
		ANG BešterRogač, Marija is member of the editorial board 2008, editor of special issue 2007. [Print ed.]. Amsterdam: Elsevier. ISSN 01677322.
	Šifra	C.04 Uredništvo mednarodne revije
	Objavljeno v	Journal of Molecular Liquids. Amsterdam: Elsevier. ISSN 01677322.
	Tipologija	3.25 Druga izvedena dela
5.	COBISS ID	34429957 Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO Polielektroliti v vodi, ali kako prisotnost hidrofobnih skupin vpliva na interakcije med ioni
		Polyelectrolytes in water: how the presence of hydrophobic groups modifies

	ANG	the ion-specific effects
Opis	SLO	Uvodno plenarno predavanje na mednarodni konferenci "Complex liquids: modern trends in exploration, understanding and application", ki se je je udeležil tudi dobitnik Nobelove nagrade prof. J.M. Lehn (Lviv, 2010).
	ANG	Introductory plenary lecture in the international conference "Complex liquids: modern trends in exploration, understanding and application", where one of the speakers was Nobel prize winner Prof. J.M. Lehn (Lviv, 2010).
Šifra	B.04	Vabljen predavanje
Objavljeno v	Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine; Programme & abstracts; 2010; Str. 27; Avtorji / Authors: Vlady Vojko	
Tipologija	1.06	Objavljeni znanstveni prispevek na konferenci (vabljen predavanje)

8. Drugi pomembni rezultati programske skupine⁷

--

9. Pomen raziskovalnih rezultatov programske skupine⁸

9.1. Pomen za razvoj znanosti²

SLO

Naše raziskave bogatijo osnovna znanja na področju fizikalne kemije raztopin in disperzij. Vodne raztopine elektrolitov in (bio)polielektrolitov (proteinov, DNA) imajo pomembno mesto v znanosti in tehnologiji. Ioni, tako preprosti kot molekularni, sodelujejo v življenjsko pomembnih procesih v našem telesu. Voda igra pri tem osnovno vlogo, ki še zdaleč ni v celoti razumljena. Raziskave stabilnosti proteinov v prisotnosti makromolekul in različnih soli, vezave ligandov na DNK in podobnosti molekul so pomembne v farmacevtski industriji in bioinženirstvu. V ekologiji in industriji pa je pomembno poznavanje lastnosti polielektrolitov, koloidov, površinsko aktivnih snovi ter interakcij med njimi in površinami. Eksperimentalne raziskave dopolnjujemo s teoretičnimi; namen našega dela je razumevanje lastnosti snovi na molekularnem nivoju. Da so te raziskave zanimive za biomedicinske vede, pričča dejstvo, da nam je bilo (skupaj s prof. K.A. Dillom, UC San Francisco) s strani National Institute of Health, USA ponovno odobreno štiriletno financiranje raziskav modelov hidratacije. Raziskovalci, ki sestavljajo to programsko skupino, so se uspešno uveljavili v svetu, o čemer pričajo objave v revijah kot so Proc. Natl. Acad. Sci. US, J. Am. Chem. Soc., Annu. Rev. Phys. Chem., Annu. Rev. Biophys. Biomol. Struct., Trends. Biochem.Sci., J. Phys. Chem. B, J. Chem. Phys., J. Stat. Phys., Langmuir, Biochemistry, Biophys. J, in J. Mol. Biology, vabljen predavanja na znanstvenih srečanjih in predavanja na tujih univerzah. Skupina aktivno sodeluje z več kot desetimi uglednimi laboratoriji po svetu in ima s sodelavci teh laboratorijev skupne objave. Raziskovalci te skupine so recenzenti za revije kot so J. Phys. Chemistry B in C, Langmuir, J. Chem. Phys., J. Am. Chem. Soc, PCCP in druge.

ANG

Our studies enrich basic knowledge in the physical chemistry of solutions and dispersions. Aqueous solutions of electrolytes and (bio)polyelectrolytes (proteins, DNA) play important role in science and technology. Ions, simple and complex, take place in vital processes in our organism. The role of water in these processes, though crucial, is not fully understood yet. Investigation of protein stability in presence of macromolecules and added salts, studies of ligand binding to DNA, or quantum-chemical similarity studies, are important for pharmaceutical industry and in bioengineering. On the other hand, understanding the properties of polyelectrolytes, surfactants and colloids and their interaction with surfaces is important for ecology and industry. Our experimental studies are closely connected with the theoretical ones: the goal is to understand the properties of matter on a molecular level. Our studies are also

important for biomedical sciences; together with a group of Professor K.A. Dill (UC San Francisco) we have been awarded the National Institute of Health USA grant for 12 years altogether. Members of the group are not unknown to their colleagues abroad. Our papers were published in recognized journals as: Proc. Natl. Acad. Sci. US, J. Am. Chem. Soc., Annu. Rev. Phys. Chem., Annu. Rev. Biophys. Biomol. Struct., Trends. Biochem. Sci., J. Phys. Chem. B, J. Chem. Phys., J. Stat. Phys., Langmuir, Biochemistry, Biophys. J., and J. Mol. Biology. In addition we held lectures on international conferences and universities. We have joint papers with researchers from more than ten laboratories in the world. Members of the group serve as reviewers for J. Phys. Chem. B and C, Langmuir, J. Chem. Phys., JACS, PCCP, etc.

9.2. Pomen za razvoj Slovenije¹⁰

SLO

Raziskovalci, ki sestavljajo programsko skupino, so člani katedre za fizikalno kemijo Fakultete za kemijo in kemijsko tehnologijo Univerze v Ljubljani. Vsi smo polno zaposleni kot univerzitetni učitelji in tako prenašamo novo pridobljena znanja na naše študente. Na katedri se predava večje število različnih predmetov s področja fizikalne kemije in sorodnih ved, ki jih letno obiskuje več kot 1000 študentov iz 6 različnih fakultet. Vsa predavanja imajo tudi laboratorijske vaje, saj je kemija eksperimentalna veda. Ob raziskavah se profesor s svojimi sodelavci uči in to znanje posreduje študentom. Brez dobrih učiteljev ni dobre šole, brez raziskav ni dobrih učiteljev. Že dlje časa sodelujemo z delovnimi organizacijami kot so Lek, Helios, Krka in druge. V teh delovnih organizacijah se zaposlujejo tudi naši diplomanti in doktoranti. Skupina torej pogloblja teoretična in eksperimentalna znanja s področja fizikalne kemije ter jih prenaša na študente ter tudi v prakso. Raziskovalci prispevamo k utrjevanju nacionalne identitete in kulturne dediščine tudi s povečevanjem prepoznavnosti Slovenije v svetu. Publikacije objavljene v uglednih znanstvenih revijah ter predavanja na konferencah in na tujih univerzah povečujejo ugled Slovenije v svetu.

ANG

The researchers participating in this project are members of the Physical chemistry Chair at FKKT University of Ljubljana where we serve as educators. We are teaching 30 subjects from physical chemistry and related fields, transferring the knowledge to our students. There are around 1000 students from six different Departments taking these classes. All the classes include laboratory practice after all, Chemistry is an experimental science. Doing research the professors and their coworkers acquire new knowledge and communicate it to students. There is no good school without good teachers; we believe that good teachers can be formed through the process of self-education: the process is called research. We have a long standing collaboration with pharmaceutical and chemical companies as Lek (Novartis group), Helios, Krka d.d, and some others. In summary, our group is engaged in research in the field of physical chemistry and in transferring this knowledge to students and to industrial practice. We contribute toward strengthening of the national identity and cultural heritage in several other ways. The publications published in distinguished journals and lectures at conferences and Universities around the World contribute toward »putting Slovenia on the map«.

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	15
bolonjski program - II. stopnja	
univerzitetni (stari) program	35

10.2. Magisterij znanosti in doktorat znanosti¹³

Šifra raziskovalca	Ime in priimek	Mag.	Dr.	MR	

26544	Mario Šimić	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	
26546	Alan Bizjak	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	
27881	Matjaž Bončina	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input type="checkbox"/>	
27704	Nina Hauptman	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	
27882	Miha Lukšič	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input type="checkbox"/>	
28560	Nejc Carl	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	
28337	Igor Drobnak	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	
29398	Andrej Lajovic	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	
29537	Sebastijan Peljhan	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	
30336	Bojan Šarac	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input type="checkbox"/>	
30846	Rok Borštnar	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	
31968	Sašo Čebašek	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	
24524	Zvone Simončič	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input type="checkbox"/>	
31996	Ana Kroflič	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	
31233	Nataša Kovačević	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	
33159	Andrej Mernik	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	
37364	Jaka Marušič	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input type="checkbox"/>	
24526	Rebeka Toporišič	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input type="checkbox"/>	
37632	Matej Bračič	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="checkbox"/>	
0	Stojan Vene	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="checkbox"/>	
31967	Simona Sitar	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	

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	
26544	Mario Šimić	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	C - Gospodarstvo	
26546	Alan Bizjak	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	C - Gospodarstvo	
28337	Igor Drobnak	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	E - Tujina	
29398	Andrej Lajovic	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	A - raziskovalni zavodi	
31968	Sašo Čebašek	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	A - raziskovalni zavodi	
31996	Ana Kroflič	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	A - raziskovalni zavodi	
31967	Simona Sitar	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	A - raziskovalni zavodi	
33159	Andrej Mernik	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	C - Gospodarstvo	

Legenda zaposlitev:

- A** - visokošolski in javni raziskovalni zavodi
B - gospodarstvo
C - javna uprava

D - družbene dejavnosti
E - tujina
F - drugo

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

Šifra raziskovalca	Ime in priimek	Sodelovanje v programski skupini	Število mesecev	
0	Vladimir Aseyev	B - uveljavljeni raziskovalec	3	
0	Yuriy V. Kalyuzhnyi	B - uveljavljeni raziskovalec	5	
0	Maksim Druchok	B - uveljavljeni raziskovalec	2	
0	Myroslav Holovko	B - uveljavljeni raziskovalec	3	
0	Neus Ripoll Torres	C - študent - doktorand	8	
0	Eric Gutierrez-Valladeres	C - študent - doktorand	6	
24526	Rebeka Toporišič	A - raziskovalec/strokovnjak	24	
0	Uroš Andjelković	D - podoktorand	9	
0	Valentina Zorzini	C - študent - doktorand	3	
36924	San Hadži	C - študent - doktorand	24	
37364	Jaka Marušič	A - raziskovalec/strokovnjak	24	

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

Sodelujemo (2010-2014) pri National Institutes of Health (NIH, ZDA) projektu "*Solvation in Biology*", Vodilna raziskovalca: V. Vlachy in K. A. Dill (Stony Brook University in Laufer Center for Physical and Quantitative Biology, New York, ZDA)

Sodelovali smo v projektu COST D43 (M. Bešter-Rogač).

J. Lah sodeluje v evropskem FP7 projektu "Enhancement of the innovation potential in SEE through new molecular solutions in research and development – InnoMol" (Nosilec: O. Vugrek, IRB, Hrvaška)

Sodelovali smo v projektu COST MP0802 "Self-assembled guanosine structures for molecular electronic devices" (J. Lah namestnik koordinatorja in člana MC), 2008-2012.

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

SLO

Projekt znanstveno raziskovalnega sodelovanja med RS in Komisariatom za alternativne energije in atomsko energijo (CEA) Francoske republike v letih 2011-2013 (Pogodba številka 100011-340001)

Sodelovali smo v bilateralnih projektih (v nekaterih večkrat) s Francijo, Avstrijo, Madžarsko, ZDA, Srbijo, Hrvaško, Finsko, Ukrajino, Rusijo, Belgijo, ...

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

SLO

--

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

možnost ustanovitve spin-off podjetja	<input type="radio"/> DA <input checked="" type="radio"/> NE
potrebni finančni vložek	EUR
ocena potrebne infrastrukture in opreme ¹⁸	

17. Izjemni dosežek v letu 2014¹⁹

17.1. Izjemni znanstveni dosežek

Naslov: Nova pot zvitja DNA v G-kvadrupeks

Objavljeno v: Angewandte Chemie 2014, 53, 4881-4884;

Avtorji: Čeru Slavko, Šket Primož, Prisljan Iztok, Lah Jurij*, Plavec Janez*

Opazili smo nov intermediat pri zvitju DNA iz telomerne regije organizma *Oxytricha nova* v G-kvadrupeks. Identificirali smo z uporabo NMR spektroskopije, gelske elektroforeze, UV-absorpcijske in CD spektroskopije ter diferenčne dinamične kalorimetrije. Kinetična analiza kaže, da je zvitje G-kvadrupeksa iz intermediata veliko hitrejše in poteče preko manjšega števila vmesnih stanj, kot zvitje iz razvite verige DNA. Zato smo predlagali novo pot zvitja DNA v G-kvadrupeks. Študija kaže, da lahko z gvaninom bogata zaporedja DNA obstajajo v predorganiziranih strukturah, ki imajo veliko težnjo po zvitju v G-kvadrupeks ob prisotnosti kationov, kot so kalijevi. Članek je prejel odlične znanstvene ocene in bil nagrajen z naslovnic v reviji (<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/anie.v53.19/issuetoc>).

17.2. Izjemni družbeno-ekonomski dosežek

Preglovo nagrado za izjemne dosežke v znanosti, ki jo podeljuje Kemijski inštitut v Ljubljani, je prejel član naše programske skupine dr. Jurij Lah, redni profesor, in sicer za dosežke pri raziskavah fizikalne kemije raztopin bioloških makromolekul.

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:

Univerza v Ljubljani, Fakulteta za
kemijo in kemijsko tehnologijo

Vojeslav Vlachy

ŽIG

Kraj in datum:

Ljubljana	2.3.2015
-----------	----------

Oznaka poročila: ARRS-RPROG-ZP-2015/13

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 Upoštevalo 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/analize/dosez/>. [Nazaj](#)

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

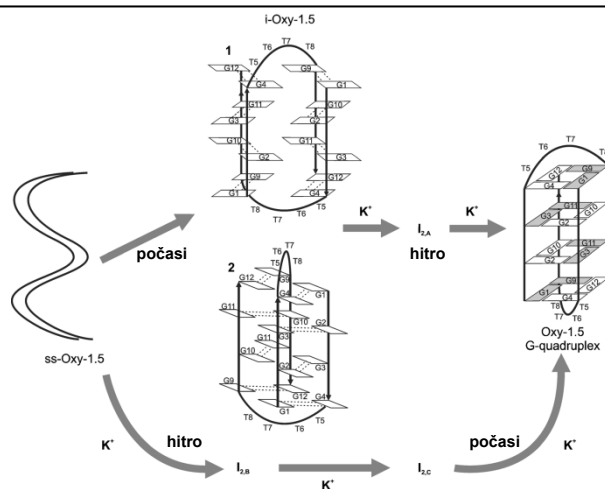
A1-94-FE-49-78-6D-73-D8-92-87-D0-0A-4B-AE-05-F3-55-57-B4-49

Priloga 1

VEDA

Področje: šifra in naziv področja

Dosežek 1: _____, Vir: *Angewandte Chemie* 2014, 53, 4881-4884.



Pot zvitja Oxy-1.5 G-kvadrupleksa, ki vključuje dolgoživ intermediat i-Oxy-1.5. Predlagani topologiji i-Oxy-1.5 sta označeni s številka 1 in 2. $I_{2,A}$, $I_{2,B}$ in $I_{2,C}$ označujejo intermediate, ki nastanejo pri strukturnem prehodu bodisi iz i-Oxy-1.5 ali iz ss-Oxy-1.5 do Oxy-1.5 G-kvadrupleksa v prisotnosti kalijevih ionov.

Opazili smo nov intermediat pri zvitju Oxy-1.5 DNA iz telomerne regije organizma *Oxytricha nova* v G-kvadrupleks. Identificirali smo ga v vodni raztopini z uporabo NMR spektroskopije, gelske elektroforeze, diferenčnih absorpcijskih spektrov, CD spektroskopije in diferenčne dinamične kalorimetrije. Kinetična analiza s kalijevimi ioni induciranih strukturnih prehodov kaže, da je zvitje Oxy-1.5 G-kvadrupleksa iz intermediate veliko hitreje in poteče preko manjšega števila vmesnih stanj, kot zvitje iz popolnoma razvite verige DNA. Zato smo predlagali novo pot zvitja DNA v G-kvadrupleks. Ta študija kaže, da lahko z gvaninom bogata zaporedja DNA obstajajo v predorganiziranih strukturah DNA, ki imajo veliko težnjo po zvitju v G-kvadrupleks ob prisotnosti kationov, kot so kalijevi. Članek je prejel odlične znanstvene ocene, zato upamo, da bodo naše raziskave pripomogle k boljšemu razumevanju tvorbe G-kvadrupleksov, kot fiziološko pomembnih struktur, v katere se lahko zvijejo deli DNA in RNA.