

Oznaka poročila: ARRS_ZV_RPROJ_ZP_2008/204

ZAKLJUČNO POROČILO O REZULTATIH RAZISKOVALNEGA PROJEKTA

A. PODATKI O RAZISKOVALNEM PROJEKTU

1. Osnovni podatki o raziskovalnem projektu

Šifra projekta	Z1-9779
Naslov projekta	Razvoj in optimizacija zeolitnih katalizatorjev z metodami molekulskega modeliranja
Vodja projekta	20393 Jernej Stare
Tip projekta	Zt Podoktorski projekt - temeljni
Obseg raziskovalnih ur	3.400
Cenovni razred	B
Trajanje projekta	01.2007 - 12.2008
Nosilna raziskovalna organizacija	104 Kemijski inštitut
Raziskovalne organizacije - soizvajalke	
Družbeno-ekonomski cilj	11 Neusmerjene raziskave (temeljne)

2. Sofinancerji¹

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

B. REZULTATI IN DOSEŽKI RAZISKOVALNEGA PROJEKTA

3. Poročilo o realizaciji programa raziskovalnega projekta²

V okviru projekta smo proučevali strukturo in katalitske lastnosti titanosilikalitnega zeolitnega katalizatorja TS-1, ki je eden najbolj poznanih in uporabljenih materialov s katalitskimi lastnostmi, predvsem za oksidativne pretvorbe majhnih organskih molekul. Ker navkljub številnim eksperimentalnim in računskim študijam njegova struktura in funkcionalnost še vedno nista dobro poznani in razumljeni, je bil projekt naravnán k pridobitvi novih pomembnih spoznanj, ki bi poglobila razumevanje nekaterih bistvenih lastnosti tega tehnološko izjemno pomembnega materiala.

Vprašanje strukture TS-1 oziroma lokacije titana v MFI zeolitni rešetki smo obravnavali s periodičnim kvantnomehanskim pristopom, ki temelji na priznani, natančni metodologiji računanja elektronske strukture (ab initio in DFT računske metode). Uporabili smo periodično Hartree-Fockovo in DFT metodologijo v povezavi z lokaliziranimi atomskimi baznimi seti kvazi-Popleovega tipa (npr. modificiran 6-31G* bazni set). Vse elektrone sistema smo obravnavali eksplicitno – z 288 atomi in 2880 elektroni v osnovni celici je to do danes eden največjih kristaliničnih sistemov, na katerih so kdaj opravili polne kvantnomehanske račune, tj. brez aproksimiranja notranjih elektronov s psevdopotenciali. Pri računanju smo polno upoštevali tako tridimenzionalno translacijsko periodičnost kot tudi simetrijske lastnosti znotraj osnovne celice, kot jih definira prostorska skupina, ter proučevali vpliv prostorske skupine na strukturo materiala in preferenco vgradnje titana na enega od dvanajstih formalno neenakih kristalografskih mest. Izkoriščanje formalne, eksperimentalno določene visoke simetrije TS-1 (prostorska skupina Pnma, $Z=8$) sicer omogoča precejšen prihranek računskega časa, a takšen model žal ne dovoljuje koncentracij titana, ki bi bile nižje od 8.33 atomskih % (koncentracija titana v dejanskem materialu je okrog 2.5%). Zato smo izgradili večje modele z večjo asimetrično enoto in nižjo simetrijo, in sicer P21/c ($Z=4$, 4.17% Ti), Pc ($Z=2$, 2.08% Ti) in P1 ($Z=1$, 1.04% Ti). Ugotovili smo, da uporabljena računska metodologija zelo dobro reproducira gostoto materiala in položaje atomov v osnovni celici – z dobrim procentom odstopanja v gostoti se npr. optimizirana struktura nesubstituiranega MFI zeolita ujema z izmerjeno dosti bolje kot katera koli druga, ki so jo kdaj določili z uporabo bolj aproksimativnih metod. Izračunana struktura se z eksperimentalno ujema približno tako dobro, kot se med seboj ujemajo neodvisne kristalografske meritve. Energijski razpon titanovih izomerov je razmeroma majhen in ne presega 6 kcal/mol pri najbolj koncentriranem Pnma modelu, z nižanjem koncentracije titana in relaksacijo osnovne celice pa se ta razpon še zmanjšuje. Četudi se izračunani preferenčni vrstni red vgradnje titana na 12 razpoložljivih mest razmeroma dobro ujema z eksperimentalnimi ocenami, iz samih energij ni mogoče zanesljivo ovreči možnosti, da vgrajevanje titana v MFI strukturo ni povsem naključno ali pogojeno z entropijskimi ali kinetičnimi efekti. Navedena spoznanja smo predstavili tako v znanstvenem članku kot tudi v obliki posterjev in predavanj na konferencah in tujih univerzah. Zaradi pomembne vloge proste entalpije smo napravili tudi oceno prostih entalpij izomerov TS-1, ki temelji na statističnomehanski analizi vibracijskih stanj. Ker je pristop računsko zelo zahteven (harmonska vibracijska analiza celega sistema z 861 vibracijskimi prostostnimi stopnjami za vsakega od 12 izomerov), je del računov proste entalpije še v teku. Preizkusili smo tudi alternativne možnosti za računanje z metodologijo ravnih valov. Medtem ko program CPMD ni dal obetavnih rezultatov, predvsem zaradi velike strojne zahtevnosti računa, se je program VASP izkazal za zelo obetavnega.

Na področju katalitske aktivnosti TS-1 smo opravili podrobno študijo reakcije epoksidacije propena z vodikovim peroksidom, ki je ena najpomembnejših reakcij, ki jih katalizira TS-1. Ker je za razumevanje katalize bistvenega pomena razumevanje vseh fundamentalnih aspektov reakcije, smo epoksidacijo propena z vodikovim peroksidom najprej simulirali v plinski fazi ter v poenostavljenih modelih vodne raztopine. Pri tem smo se poslužili uveljavljene DFT kvantnokemijske metodologije v kombinaciji s standardnimi postopki geometrijske optimizacije, harmonske vibracijske analize, optimizacije prehodnih stanj in računanja reakcijske poti. Z uporabo različnih modelov reakcije, ki jih lahko predpostavimo na osnovi elementarne organske kemije, smo pokazali, da je izmed vseh mehanizmov termodinamsko in kinetično najbolj ugoden polarni mehanizem s sočasnim napadom peroksidnega kisika na dvojno vez propena in prenosom protona na drugi kisik v molekuli H₂O₂; radikalski model smo izključili tudi na podlagi CISD računov. V naslednji stopnji smo proučevali vpliv številnih zunanjih faktorjev, ki lahko spremenijo termodinamiko ali kinetiko reakcije, kot na primer eksplicitne molekule topila in zunanje električno polje. Tako molekule vode kot homogeno električno polje imajo katalitski učinek, saj nižajo energijo aktivacije za epoksidacijo propena, na reakcijsko energijo pa imajo le neznamen vpliv. Predpostavljamo lahko, da zeolitna okolica znotraj kanalov katalizatorja TS-1 tudi s svojim električnim poljem pripomore h katalitski aktivnosti materiala – vsaj v določeni meri. Končno pa smo epoksidacijo propena proučevali tudi v prisotnosti aktivnega mesta katalizatorja TS-1 ter eksplicitne zeolitne okolice. Aktivno mesto TS-1 smo modelirali na več načinov, zlasti z različno velikimi skupki atomov, ki smo jih razpostavili na ustrezna mesta iz eksperimentalno določene strukture. Skupki so obsegali od 5 do približno 200 SiO₄/TiO₄ tetraedrov. Ker za modele, ki so večji od nekaj deset atomov, polna kvantnomehanska obravnava ni možna, smo večje skupke modelirali z dvonivojskim kvantno-klasičnim pristopom QM/MM oz. metodologijo

ONIOM, pri čemer smo titanovo aktivno mesto in njegovo najbližjo okolico obravnavali na kvantnem, daljno okolico pa na klasičnem nivoju. Tako kot molekule vode ali električno polje tudi TS-1 zniža aktivacijsko energijo, a v manjši meri, kot bi lahko pričakovali glede na učinkovitost katalizatorja. Eden izmed vzrokov je v tem, da manjši modeli aktivnega mesta ne upoštevajo kompleksnosti okolice. Žal z večjimi modeli tega primanjkljaja ni bilo mogoče odpraviti, ker model ni ustrezno upošteval daljnosežnih elektrostatskih interakcij v zeolitu. Na to težavo so naleteli tudi drugi raziskovalci, ki so modelirali sorodne zeolitne sisteme; v okviru uporabljene metodologije do danes še ni bilo ustreznih izboljšav. Drugi vzrok za to, da je izračunana katalitska aktivnost TS-1 nižja od pričakovane, je v alternativnih reakcijskih mehanizmih, ki vključujejo hidrolizo in/ali epoksidacijo aktivnega mesta v TS-1. V okviru projekta smo proučili nekatere izmed možnih mehanizmov, ki pa s kinetičnega vidika niso doprinesli bistvenih izboljšav. Podobno kot pri problemu strukture TS-1 smo izsledke, povezane s katalitsko aktivnostjo katalizatorja, predstavili v obliki člankov in aktivne udeležbe na znanstvenih srečanjih.

4. Ocena stopnje realizacije zastavljenih raziskovalnih ciljev³

Strukturne študije so pokazale, da položajna preferenca vgradnje titana v MFI zeolitno strukturo ni izrazita, tako z vidika energije kot tudi proste entalpije. Takšna ugotovitev v sami zasnovi projekta ni bila izključena niti posebej nepričakovana, čeravno del eksperimentalnih študij kaže nasprotno. Ker pa tudi med eksperimentalnimi izsledki ni soglasja, smatramo, da položaj titana v TS-1 za samo katalitsko aktivnost materiala ni odločilnega pomena. Pri izgradnji modela, ki služi za ovrednotenje katalitskega mehanizma, v katerem sodeluje TS-1 se glede položaja titana lahko torej oprimumo bodisi na eksperimentalno izkušnjo, bodisi intuitivno izberemo npr. tisti položaj, ki je v zeolitni strukturi najmanj sterično oviran in s tem najlažje dostopen gostujočim molekulam (tj. na stičiščih kanalov). Zaradi zelo natančnega modela, ki sledi vsem fundamentalnim principom, od kvalitetnega opisa elektronske strukture do rigoroznih periodičnih in drugih simetrijskih lastnosti sistema, predstavlja računski študija strukture TS-1 v okviru tega projekta zelo pomemben, znanstveno relevanten in vsebinsko zaokrožen prispevek k rešitvi tega vprašanja. Nekoliko več odprtih vprašanj ostaja pri katalitskem mehanizmu epoksidacije propena, kjer QM/MM metodologija, ki je za manjše sisteme veljala za dokaj zanesljivo, ni dala želenih rezultatov; polna periodična obravnava problema pa z enako metodologijo, kot smo jo uporabili pri vprašanju strukture TS-1, zaradi nizke simetrije sistema ni izvedljiva v razumnem času (edina smiselna je uporaba prostorske skupine P1 s približno 300 neenakimi atomi, kar je časovno zelo potratno, pa tudi optimizacija prehodnih stanj ni ustrezno programsko podprta). Za bolj obetavnega se je izkazal pristop po metodologiji ravnih valov (program VASP), kjer pa so računi še v teku. Prav tako so nekateri izsledki strukturnih študij TS-1, ki smo jih opravili v okviru tega projekta, še v pripravi za objavo, manjši del izračunov pa je prav tako še v teku.

Ocenjujemo, da je tematika, ki jo je obravnaval projekt, visoko relevantna tako za znanost kot tudi za kemijsko industrijo, zato smo jo z začetkom leta 2009 uspešno vključili v dejavnosti programske skupine P1-0012 »Molekularne simulacije, bioinformatika in načrtovanje učinkovin« in predstavlja pomemben element v usmeritvi programske skupine. S tem je bil uresničen tudi eden od osnovnih namenov podoktorskega projekta, namreč integracija pridobljenih znaj in ekspertize nosilca projekta v širšo in bolj dolgoročno raziskovalno dejavnost v okviru programske skupine. To pa zagotavlja tudi, da bo aktualna problematika strukture in aktivnosti zeolitnih katalizatorjev še naprej ostala predmet raziskav v našem prostoru. Zaradi naštetega smatramo realizacijo ciljev projekta kot ustrezno in uspešno.

5. Utemeljitev morebitnih sprememb programa raziskovalnega projekta⁴

--

6. Najpomembnejši znanstveni rezultati projektne skupine⁵

Znanstveni rezultat			
1.	Naslov	SLO	Mechanistic aspects of propene epoxidation by H ₂ O ₂ . Catalytic role of water molecules, external electric field, and zeolite framework of TS-1.

Zaključno poročilo o rezultatih raziskovalnega projekta

		ANG	Mechanistic aspects of propene epoxidation by H ₂ O ₂ . Catalytic role of water molecules, external electric field, and zeolite framework of TS-1.
Opis		SLO	V članku predstavljamo študijo epoksidacije propena z vodikovim peroksidom pri različnih tipih okolice, vključno z zeolitno okolico katalizatorja TS-1. Računali smo termodinamske in kinetične parametre in njihovo odvisnost od okolice, katere vpliv na aktivacijsko bariero je znaten. Že molekula vode ima opazen katalitski učinek, še občutnejši pa je vpliv zeolitne okolice TS-1 ter vpliv električnega polja. Natančno smo ovrednotili reakcijsko pot pretvorbe propena v propilen oksid. Vpliv TS-1 smo poskušali ovrednotiti tudi z bolj kompleksnim QM/MM modelom, ki pa ni dal zadovoljivih rezultatov.
		ANG	This work includes a study of the propene epoxidation by hydrogen peroxide in different types of environment, from the gas phase to the TS-1. We calculated the energy and activation barrier of the reaction. The barrier proved to be very sensitive to environment. Even a single water molecule has a notable catalytic effect, and so do the explicit zeolite environment and the electric field. An attempt has been made to built QM/MM model of TS-1, however this model did not yield adequate results due improper charge embedding of the MM charges into the QM wavefunction.
Objavljeno v	J. Stare, N. J. Henson, J. Eckert, J. Chem. Inf. Mod., 2009, 1-14, doi: 10.1021/ci800227n.		
Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek		
COBISS.SI-ID	4121370		
2. Naslov		SLO	Titanium site preference problem in the TS-1 zeolite catalyst : a periodic Hartree-Fock study
		ANG	Titanium site preference problem in the TS-1 zeolite catalyst : a periodic Hartree-Fock study
Opis		SLO	S periodično HF metodo smo obravnavali problem preferenčne lokacije titana v strukturi TS-1. Modelirali smo 12 različnih izomerov TS-1 in primerjali njihove energije ter vpliv simetrijskih elementov na relativne energije izomerov. Ugotovili smo, da je energijski razpon izomerov majhen, okrog 5 kcal/mol, in da se z nižanjem koncentracije titana še zmanjšuje. Zaradi majhnih energijskih razlik med izomeri ni mogoče izključiti povsem naključne porazdelitve titana v MFI strukturi, niti predpostavke, da je struktura pogojena s kinetiko sinteze materiala in ne s termodinamskimi efekti.
		ANG	We studied the Ti location problem in the TS-1 catalyst by the periodical HF method. We modeled the 12 Ti-substitution isomers and compared their energies, also as function of symmetry constraints imposed by the space group. The energy range of the isomers was found to be narrow (about 5 kcal/mol) and decreasing on the decreasing Ti content. Due to small energy differences between the isomers, one cannot rule out the possibility that the Ti-siting is entirely random, or governed by entropic or kinetic effects.
Objavljeno v	G. Pirc, J. Stare, Acta Chim. Slov., 2008, 55, 951-959.		
Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek		
COBISS.SI-ID	4076826		
3. Naslov		SLO	Proton Dynamics in the Strong Chelate Hydrogen Bond of Crystalline Picolinic Acid N-Oxide.
		ANG	Proton Dynamics in the Strong Chelate Hydrogen Bond of Crystalline Picolinic Acid N-Oxide.
Opis		SLO	Članek vsebuje spektroskopsko in računsko študijo vodikove vezi v N-oksidu pikolinske kisline v kristaliničnem stanju. Računski del obsega simulacijo vibracijskega spektra vodikove vezi. Pristop temelji na dinamičnem vzorčenju protonskega potenciala, izračunanega iz posnetkov struktur, dobljenih s predhodno opravljene simulacije molekulske dinamike s kvantnim poljem sil. Primerjava z eksperimentalnimi vibracijskimi spektri (IR, Raman, INS) pokaže, da je upoštevanje naštetih vplivov odločilnega pomena za dobro ujemanje izračunanih spektroskopskih količin z eksperimentalnimi.
		ANG	This work includes a spectroscopic and computational study of crystalline picolinic acid N-oxide. We simulated the vibrational spectrum of the O-H moiety of the H-bond. We propose a novel approach for the evaluation of contours of vibrational bands. The approach is based on dynamical sampling of the proton potential function, acquired from the snapshots of the MD simulation. Nuclear quantum effects have proved to be crucial for a reasonable reproduction of the experimental contour of the OH stretching

		band.
	Objavljeno v	J. Stare, J. Panek, J. Eckert, J. Grdadolnik, J. Mavri, D. Hadži, J. Phys. Chem A, 2008, 844/845, 215-221.
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek
	COBISS.SI-ID	3743002
4.	Naslov	SLO Variable temperature neutron diffraction and X-ray charge density studies of tetraacetylene
		ANG Variable temperature neutron diffraction and X-ray charge density studies of tetraacetylene
	Opis	SLO V članku predstavljamo študijo strukture tetraacetietana z difrakcijskimi in računskimi metodami. Struktura molekule je asimetrična, četudi bi glede na kemijsko simetričnost molekule tetraacetiletana pričakovali simetrično strukturo. Asimetričnost strukture smo potrdili s simulacijo molekulske dinamike. Poglavitni vzrok za asimetričnost strukture je v sklopitvi med protonskim gibanjem in rotacijo metilnih skupin, ki je zaradi specifičnih interakcij v kristalu je otežena, protonski potencial pa je asimetričen.
		ANG This paper includes a crystallographic and computational study of the structure of tetraacetylene (TAE). The molecule is asymmetric despite the fact that it is chemically symmetric. In our quest for the driving force that renders the TAE structure to be asymmetric, we performed a CPMD simulation and found that the main origin of the asymmetry is in the coupling between the torsion of methyl groups and the longitudinal proton motion. Since the methyl rotations are hindered due to weak C-H...O interactions within the crystal structure, the resulting proton potential is no longer symmetric.
	Objavljeno v	P. Piccoli, T. Koetzle, A. Schultz, E. Zhurova, J. Stare, A. Pinkerton, J. Eckert, D. Hadži, J. Phys. Chem. A 2008, 112, 6667-6677.
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek
COBISS.SI-ID	3975706	
5.	Naslov	SLO
		ANG
	Opis	SLO
		ANG
	Objavljeno v	
	Tipologija	
	COBISS.SI-ID	

7. Najpomembnejši družbeno-ekonomsko relevantni rezultati projektne skupine⁶

	Družbeno-ekonomsko relevantni rezultat	
1.	Naslov	SLO J. Stare, Periodic quantum mechanical calculations: a challenging supporting tool to crystallographic methods
		ANG J. Stare, Periodic quantum mechanical calculations: a challenging supporting tool to crystallographic methods
Opis	SLO V prispevku na več aktualnih primerih predstavljamo pomen kvantnokemijskih računskih metod za modeliranje trdnega stanja ter njihovo uporabo za podporo kristalografskim študijam. Med številnimi aplikacijami posebej izpostavljamo ab-initio in DFT modeliranje zeolitnih struktur.	
	ANG We presented in this lecture the relevance of periodic quantum mechanical computational methods and their application as supporting tool for crystallographic studies. Among the examples we also stressed our studies of zeolites.	
	Šifra	B.03 Referat na mednarodni znanstveni konferenci
	Objavljeno v	A. Pevec, I. Leban (Eds.), Seventeenth Croatian-Slovenian Crystallographic Meeting, 19 - 22 June, 2008, Ptuj, Slovenia. Book of abstracts and programme. Ljubljana: University of Ljubljana, Faculty of Chemistry and Chemical Technology, 2008, p. 45.
	Tipologija	1.12 Objavljeni povzetek znanstvenega prispevka na konferenci

Zaključno poročilo o rezultatih raziskovalnega projekta

	COBISS.SI-ID	3959578
2.	Naslov	<i>SLO</i> G. Pirc, J. Stare, Periodic QM methods as a supporting tool to crystallography: the titanium site preference problem in the TS-1 zeolite catalyst
		<i>ANG</i> G. Pirc, J. Stare, Periodic QM methods as a supporting tool to crystallography: the titanium site preference problem in the TS-1 zeolite catalyst
Opis	<i>SLO</i>	V tem prispevku predstavljamo periodično kvantnokemijsko študijo problema lokacije titana v TS-1 zeolitnem katalizatorju, kot smo jo obširneje obravnavali v članku, predstavljenem v rubriki 6.
	<i>ANG</i>	Our recent periodic Hartree-Fock study of the Ti-site preference problem in TS-1 has been presented in this talk. More details can be found in the corresponding paper presented in Section 6 of this report.
Šifra	B.03 Referat na mednarodni znanstveni konferenci	
Objavljeno v	in: A. Pevec, I. Leban (Eds.), Seventeenth Croatian-Slovenian Crystallographic Meeting, 19 - 22 June, 2008, Ptuj, Slovenia. Book of abstracts and programme. Ljubljana: University of Ljubljana, Faculty of Chemistry and Chemical Technology, 2008, p. 46.	
Tipologija	1.12 Objavljeni povzetek znanstvenega prispevka na konferenci	
COBISS.SI-ID	3959834	
3.	Naslov	<i>SLO</i> J. Stare, G. Pirc, A fully periodical, all electron quantum-mechanical study of titanium site preference problem in the TS-1 zeolite catalyst
		<i>ANG</i> J. Stare, G. Pirc, A fully periodical, all electron quantum-mechanical study of titanium site preference problem in the TS-1 zeolite catalyst
Opis	<i>SLO</i>	Študijo strukture katalizatorja TS-1, ki smo ga modelirali s periodično Hartree-Fockovo metodo in predstavili v točki 6, smo še dodatno nadgradili z uporabo (a) naprednejše DFT B3LYP metode, (b) fleksibilne osnovne celice in (c) prostorskih skupin z nižjo simetrijo, ki omogočajo modeliranje manjših koncentracij titana v TS-1. Preliminarne rezultate te študije smo predstavili na znanstvenem srečanju v obliki posterja, obširneje pa bo ta problematika obravnavana v članku, ki je v pripravi.
	<i>ANG</i>	The poster presented at the international conference included an upgrade to the periodic Hartree-Fock study of the structure of TS-1 in that (a) the more reliable DFT method has been used, (b) the unit cell of TS-1 has been relaxed during structure optimization, and (c) lower-symmetry space groups have been employed, allowing for lower concentration of titanium. The presented results were on a preliminary level; the full study is near completion and will be published shortly.
Šifra	B.03 Referat na mednarodni znanstveni konferenci	
Objavljeno v	P. L. Garrido (Ed.), Modeling and simulation of new materials: Tenth Granada Lectures, Granada, Spain, 15-19 September 2008, (AIP conference proceedings, vol. 1091). Melville: American Institute of Physics, 2009, p. 294.	
Tipologija	1.12 Objavljeni povzetek znanstvenega prispevka na konferenci	
COBISS.SI-ID	4108570	
4.	Naslov	<i>SLO</i> J. Stare, Structure and spectroscopy of hydrogen-bonded systems by advanced quantum-mechanical methods
		<i>ANG</i> J. Stare, Structure and spectroscopy of hydrogen-bonded systems by advanced quantum-mechanical methods
Opis	<i>SLO</i>	Napredne kvantnomehanske metode za napovedovanje lastnosti sistemov z vodikovimi vezmi so zaželeno dopolnilo že uveljavljenim računskim metodam. V okviru predavanja smo se osredotočili predvsem na metode, ki obravnavajo gibanje atomskih jeder prek Born-Oppenheimerjevega približka in temeljijo na reševanju vibracijske Schrodingerjeve enačbe. Močan poudarek je bil tudi na kvantnomehanskih simulacijah trdnega stanja. Predstavili smo kombinirano računsko in eksperimentalno študijo, ki je podrobneje opisana kot tretji znanstveni dosežek v tem poročilu.
	<i>ANG</i>	Advanced computational methodologies in the field of modeling of hydrogen-bonded systems have been presented, mainly those based on the treatment of nuclear motion beyond the Born-Oppenheimer approximation and the solving of the vibrational Schroedinger equation. The computational study

		published and presented in this report as the third entry in the scientific achievement section (section 6) has been outlined in detail.
Šifra	B.04	Vabljen predavanje
Objavljeno v	Lecture at Department of Chemistry, Coimbra, Portugal (Universidade de Coimbra, Faculdade de Ciencias e tecnologia), 8-13 July 2007.	
Tipologija	3.14	Predavanje na tuji univerzi
COBISS.SI-ID	3744794	
5. Naslov	SLO	J. Stare, Advanced methods in computational chemistry
	ANG	J. Stare, Advanced methods in computational chemistry
Opis	SLO	Predstavili smo napredne metodologije v molekularnem modeliranju in njihovo uporabnost za proučevanje problemov strukture snovi, spektroskopije in reaktivnosti. Modeliranje kristalinične snovi, posebej trdnih materialov s katalitskimi lastnostmi, je bil pomemben sestavni del predavanja.
	ANG	Advanced molecular modeling technologies have been presented in this talk, with a special focus devoted to the studies of crystalline matter, spectroscopy and reactivity. The presentation included various examples of our recent studies of the structure and catalytic activity of TS-1.
Šifra	B.04	Vabljen predavanje
Objavljeno v	Faculty of Pharmacy, University of Belgrade, Serbia, November 11, 2008.	
Tipologija	3.14	Predavanje na tuji univerzi
COBISS.SI-ID	4114458	

8. Pomen raziskovalnih rezultatov projektne skupine⁷

8.1. Pomen za razvoj znanosti⁸

SLO

Projekt je združeval visoko relevantno znanstveno problematiko strukture in katalitske aktivnosti zeolitnih materialov, prvovrstno raziskovalno metodologijo s področja kvantnokemijskih simulacij ter kvalitetne objave v uglednih mednarodnih znanstvenih revijah in na mednarodnih srečanjih. Dodatna vrednost projekta za domačo in mednarodno znanost je vpeljava in utrditev periodičnih kvantnih računskih metod, ki v primerjavi z izoliranimi modeli še niso dosegle primerljive ravni uporabe. Metode, ki smo jih uporabili za modeliranje zeolitnih katalizatorjev, so uporabne tudi za proučevanje drugih aktualnih znanstvenih problemov, povezanih s kemijo trdnega stanja. Zato gre med dosežke projekta šteti tudi uporabo metodologije za periodično računanje na sistemih, ki sicer niso v neposredni povezavi s problematiko, obravnavano v tem projektu. Zaradi podprtosti s kvalitetnimi periodičnimi računi so raziskave matične programske skupine, v katerih je bil udeležen vodja tega projekta, pridobile na relevantnosti in zanesljivosti in so rezultirale v kvalitetnih objavah. Obvladovanje tehnik za periodično kvantno računanje je trajna in univerzalna pridobitev tega projekta.

ANG

This project considered a highly relevant scientific problem of the structure and catalytic activity of zeolite materials and was based on a first-class research methodology in the field of solid-state quantum mechanical simulations. Our results were published in high-quality scientific journals and were presented at various international meetings and at foreign universities. A special value of the project is the adoption of periodical quantum methods which are gaining importance in the computational treatment of crystalline matter, yet they have still not reached the mature stage as seen with gas-phase methods. Importantly, the employed methodologies are easily transferable to other relevant scientific problems in the solid state. Thus the application of the methods adopted in the course of this project to crystalline systems not directly related to the main scope of the project can also be listed as this project's achievements. Namely, a considerable amount of work in which this project's leader was involved, included periodical quantum methods, which significantly improved the scientific value of our studies, as reflected in high-quality publications. All in all, adoption of periodical quantum computational methodologies represents a permanent and universal achievement of the project.

8.2. Pomen za razvoj Slovenije⁹

SLO

Projekt ima pomembno vlogo za razvoj slovenske znanosti iz več razlogov. V prvi vrsti vnaša v domači raziskovalni prostor nova vrhunška znanja. Periodične kvantno kemijske računske metode predstavljajo pomemben napredek v računski kemiji in se vse bolj uveljavljajo kot dopolnilo eksperimentalnim metodam za proučevanje lastnosti trdne snovi, a v Sloveniji je izkušenj s tovrstnimi metodologijami razmeroma malo. Posebna vrednost projekta je tudi v krepitvi domačega interdisciplinarnega sodelovanja, saj se s širitvijo računalniških simulacij na področje trdne snovi odpirajo nove možnosti za sodelovanje z domačimi raziskovalnimi skupinami, ki proučujejo snov v kristaliničnem stanju.

Poleg neposrednega pomena za razvoj slovenske znanosti in za krepitev interdisciplinarnega sodelovanja pa ima projekt tudi posredno uporabno vrednost za aplikacije v industrijskih raziskavah, saj obravnava aktualno problematiko, ki ima končno uporabnost tudi v domači kemijski industriji – res pa je, da je aplikativni učinek najverjetneje dosegljiv kvečjemu na daljši rok.

ANG

This project is highly relevant for the development of Slovenian science for several reasons. Firstly, it enriches the Slovenian research with new, high-quality and high-impact knowledge and techniques. Periodical quantum methodologies represent an important upgrade in the field of computational chemistry and are gaining importance as supporting tool to experimental studies of the crystalline matter. However, there is only little experience with these methods in Slovenia, hence any experience in this field is of a great value. Additional value of the project is in the fact that it stimulates interdisciplinary collaboration between complementary Slovenian research groups. With a rather novel field of quantum simulations of the crystalline matter being available in Slovenia, a number of new opportunities for joint experimental and theoretical research has emerged.

Apart from direct application for Slovenian science, this project features possible applications for industrial research. The topics considered in the project are of a high industrial relevance and can thus be transferred to actual industrial projects in Slovenia. Nevertheless it is likely that any application to industrial research can be established only at a longer timescale.

9. Samo za aplikativne projekte!

Označite, katerega od navedenih ciljev ste si zastavili pri aplikativnem 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	

Zaključno poročilo o rezultatih raziskovalnega projekta

	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

--

10. Samo za aplikativne projekte!

Označite potencialne vplive oziroma učinke vaših rezultatov na navedena področja

	Vpliv	Ni vpliva	Majhen vpliv	Srednji vpliv	Velik vpliv	
G.01	Razvoj visoko-šolskega izobraževanja					
G.01.01.	Razvoj dodiplomskega izobraževanja	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.01.02.	Razvoj podiplomskega izobraževanja	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.01.03.	Drugo: <input type="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"/>	

Zaključno poročilo o rezultatih raziskovalnega projekta

G.02.10.	Dvig izobrazbene strukture zaposlenih	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.11.	Nov investicijski zagon	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.12.	Drugo:	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.03	Tehnološki razvoj					
G.03.01.	Tehnološka razširitev/posodobitev dejavnosti	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.03.02.	Tehnološko prestrukturiranje dejavnosti	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.03.03.	Uvajanje novih tehnologij	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.03.04.	Drugo:	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.04	Družbeni razvoj					
G.04.01	Dvig kvalitete življenja	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.04.02.	Izboljšanje vodenja in upravljanja	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.04.03.	Izboljšanje delovanja administracije in javne uprave	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.04.04.	Razvoj socialnih dejavnosti	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.04.05.	Razvoj civilne družbe	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.04.06.	Drugo:	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.05.	Ohranjanje in razvoj nacionalne naravne in kulturne dediščine in identitete	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.06.	Varovanje okolja in trajnostni razvoj	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.07	Razvoj družbene infrastrukture					
G.07.01.	Informacijsko-komunikacijska infrastruktura	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.07.02.	Prometna infrastruktura	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.07.03.	Energetska infrastruktura	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.07.04.	Drugo:	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.08.	Varovanje zdravja in razvoj zdravstvenega varstva	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.09.	Drugo:	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	

Komentar

--

11. Pomen raziskovanja za sofinancerje, navedene v 2. točki¹⁰

1.	Sofinancer	
	Vrednost sofinanciranja za celotno obdobje trajanja projekta je znašala:	EUR
	Odstotek od utemeljenih stroškov projekta:	%
	Najpomembnejši rezultati raziskovanja za sofinancerja	Šifra

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

C. IZJAVE

Podpisani 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, za objavo 6., 7. in 8. točke na spletni strani <http://sicris.izum.si/> ter obdelavo teh podatkov za evidence ARRS
- so vsi podatki v obrazcu v elektronski obliki identični podatkom v obrazcu v pisni obliki

Podpisi:

Jernej Stare	in/ali	
podpis vodje raziskovalnega projekta		zastopnik oz. pooblaščen oseba RO

Kraj in datum:

Ljubljana

16.4.2009

Oznaka poročila: ARRS_ZV_RPROJ_ZP_2008/204

¹ Samo za aplikativne projekte. [Nazaj](#)

² Napišite kratko vsebinsko poročilo, kjer boste predstavili raziskovalno hipotezo in opis raziskovanja. Navedite ključne ugotovitve, znanstvena spoznanja ter rezultate in učinke raziskovalnega projekta. Največ 18.000 znakov vključno s presledki (približno tri strani, velikosti pisave 11). [Nazaj](#)

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

⁴ Samo v primeru bistvenih odstopanj in sprememb od predvidenega programa raziskovalnega projekta, kot je bil zapisan v predlogu raziskovalnega projekta. Največ 3.000 znakov vključno s presledki (približno pol strani, velikosti pisave 11). [Nazaj](#)

⁵ Navedite največ pet najpomembnejših znanstvenih rezultatov projektne skupine, ki so nastali v času trajanja projekta v okviru raziskovalnega projekta, ki je predmet poročanja. Za vsak rezultat navedite naslov v slovenskem in angleškem jeziku (največ 150 znakov vključno s presledki), rezultat opišite (največ 600 znakov vključno s presledki) v slovenskem in angleškem jeziku, navedite, kje je objavljen (največ 500 znakov vključno s presledki), izberite ustrezno šifro tipa objave po Tipologiji dokumentov/del za vodenje bibliografij v sistemu COBISS ter napišite ustrezno COBISS.SI-ID številko bibliografske enote. Navedeni rezultati bodo objavljeni na spletni strani <http://sicris.izum.si/>.

PRIMER (v slovenskem jeziku):

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

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

Objavljeno v: OBERMAJER, N., PREMZL, A., ZAVAŠNIK-BERGANT, T., TURK, B., KOS, J.. Carboxypeptidase cathepsin X mediates $\beta 2$ - integrin dependent adhesion of differentiated U-937 cells. Exp. Cell Res., 2006, 312, 2515-2527, JCR IF (2005): 4.148

Tipologija: 1.01 - Izvirni znanstveni članek

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

⁶ Navedite največ pet najpomembnejših družbeno-ekonomsko relevantnih rezultatov projektne skupine, ki so nastali v času trajanja projekta v okviru raziskovalnega projekta, ki je predmet poročanja. Za vsak rezultat navedite naslov (največ 150 znakov vključno s presledki), rezultat opišite (največ 600 znakov vključno s presledki), izberite ustrezen rezultat, ki je v Šifrantu raziskovalnih rezultatov in učinkov (Glej: <http://www.arrs.gov.si/sl/gradivo/sifranti/sif-razisk-rezult.asp>), navedite, kje je rezultat objavljen (največ 500 znakov vključno s presledki), izberite ustrezno šifro tipa objave po Tipologiji dokumentov/del za vodenje bibliografij v sistemu COBISS ter napišite ustrezno COBISS.SI-ID številko bibliografske enote.

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

⁷ 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](#)

⁸ Največ 4.000 znakov vključno s presledki [Nazaj](#)

Zaključno poročilo o rezultatih raziskovalnega projekta

⁹ Največ 4.000 znakov vključno s presledki Nazaj

¹⁰ Rubrike izpolnite/prepišite 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

Obrazec: ARRS-ZV-RPROJ-ZP/2008 v1.00