

Oznaka poročila: ARRS-RPROJ-ZP-2013/16



ZAKLJUČNO POROČILO RAZISKOVALNEGA PROJEKTA

A. PODATKI O RAZISKOVALNEM PROJEKTU

1. Osnovni podatki o raziskovalnem projektu

Šifra projekta	J1-2103
Naslov projekta	Nove metode za detekcijo jedrske kvadrupolne resonance N-14
Vodja projekta	7518 Tomaž Apih
Tip projekta	J Temeljni projekt
Obseg raziskovalnih ur	4173
Cenovni razred	C
Trajanje projekta	05.2009 - 04.2012
Nosilna raziskovalna organizacija	106 Institut "Jožef Stefan"
Raziskovalne organizacije - soizvajalke	
Raziskovalno področje po šifrantu ARRS	1 NARAVOSLOVJE 1.02 Fizika 1.02.01 Fizika kondenzirane materije
Družbeno-ekonomski cilj	13.01 Naravoslovne vede - RiR financiran iz drugih virov (ne iz SUF)

2. Raziskovalno področje po šifrantu FOS¹

Šifra	1.03
- Veda	1 Naravoslovne vede
- Področje	1.03 Fizika

B. REZULTATI IN DOSEŽKI RAZISKOVALNEGA PROJEKTA

3. Povzetek raziskovalnega projekta²

SLO

Jedrska kvadrupolna interakcija dušika ^{14}N , ki je prisoten v vrsti organskih in anorganskih substanc, natančno meri porazdelitev elektronov v okolici atoma dušika v trdnih snoveh. Na porazdelitev elektronov v okolici dušikovega atoma močno vplivajo medatomske in medmolekularne interakcije, predvsem kemijske vezi. Že pri

majhni spremembi strukture snovi, na primer v kristalnih polimorfih, je spremembe jedrske kvadrupolne interakcije ^{14}N ponavadi dosti večja od ločljivosti meritev. Vpliv vodikovih vezi na jedrsko kvadrupolno interakcijo ^{14}N je zelo močan. Merjenje jedrske kvadrupolne interakcije ^{14}N predstavlja torej občutljivo metodo za določanje kristalne in molekularne strukture, študij kemijskih vezi, določanje in razumevanje sprememb strukture snovi (polimorfi, fazni prehodi) ter za karakterizacijo materialov. V polikristalnih vzorcih, s katerimi imamo ponavadi opravka pri študiju farmacevtskih substanc, raziskavah vodikovih vezi, iskanju eksplozivov itd. so zaradi izjemno širokih resonančnih črt meritve z jedrsko magnetno resonanco izjemno zahtevne, običajno pa celo nemogoče. V tem primeru je bolje uporabiti jedrsko kvadrupolno resonanco (»Nuclear Quadrupole Resonance«, NQR), s katero izmerimo kvadrupolne resonančne frekvence ^{14}N izven magnetnega polja. Tudi te meritve so zahtevne, dolgotrajne in pogosto neuspešne zaradi majhnega magnetnega momenta ^{14}N in nizkih ter vnaprej neznanih kvadrupolnih resonančnih frekvenc.

V okviru obstoječega projekta smo te težave reševali na dva načina:

z izboljšanjem tehnike čiste jedrske kvadrupolne resonance ^{14}N in sicer z razvojem novih multipulznih sekvenc, ki omogočajo hitrejše iskanje NQR črt in merjenje NQR spektrov

z razvojem novih metod jedrske kvadrupolne dvojne resonance, ki so občutljivejše od dosedanjih in so uporabne pri eksperimentalnih razmerah, ko so do sedaj znane metode odpovedale

Projekt je bil uspešen na znanstvenem področju, saj smo v času izvajanja projekta (2009-2012) v mednarodnih znanstvenih revijah objavili 30 izvirnih znanstvenih člankov s področja tematike raziskovanega projekta, ter dve poglavji v monografiji založbe Springer.

Rezultati projekta nimajo samo znanstvene veljave, temveč omogočajo uporabo ^{14}N NQR na različnih področjih, od varnostnih aplikacij (npr. oddaljena detekcija eksplozivov skritih v prtljagi ali na telesu), detekciji slabih ali ponarejenih zdravil, ali v aplikacij v farmacevtski proizvodnji in razvoju. S finančno podporo organizacije NATO smo tako organizirali dve mednarodni delavnici »NATO Advanced Research Workshop on Magnetic Resonance detection of Explosives and Illicit Materials«, MRDE-2011 in MRDE-2012.

Z evropskim projektom CONPHIRMER sodelujemo pri razvoju tehnike ^{14}N NQR detekcije ponarejenih zdravil v originalni embalaži, s slovensko farmacevtsko družbo pa smo začeli sodelovanje o uporabi ^{14}N NQR pri razvoju zdravil.

ANG

Nuclear quadrupole interaction of nitrogen ^{14}N , which is present in many organic as well as inorganic compounds is directly correlated with the distribution of the electrons in the vicinity of the nitrogen site in solid compounds. This distribution, on the other hand, is determined by the interatomic and intermolecular interactions, primarily by the chemical bond. Even miniscule change of the atomic structure (such as crystalline polymorphism) usually significantly changes nuclear quadrupole interaction. The influence of the hydrogen bond is also significant. The measurements of the quadrupole interaction of ^{14}N is thus a sensitive method for the determination of crystalline and molecular structure, chemical bond study, understanding of the changes of the crystalline structure (polymorphism, phase transitions) and characterization of materials.

One can determine the nuclear quadrupole interaction ^{14}N either by nuclear quadrupole resonance (NQR) or by nuclear magnetic resonance (NMR). However, due to low NMR frequency, and very large line widths (above 1 MHz), NMR is usually possible in monocrystals only. For this reason NMR technique is usually not possible for polycrystalline samples, such as pharmaceutical substances, hydrogen bond studies, detection of explosives etc. In such a case it is better to use NQR to

determine quadrupole resonance frequencies in zero magnetic field. These measurements are also often demanding, slow or even unsuccessful due to low and/or unknown NQR frequencies.

To cope with these deficiencies we have:

- improved ^{14}N NQR techniques by developing new multipulse sequences, which enable faster search of NQR resonance lines and faster measurement of NQR spectra
- developed new methods of double nuclear quadrupole resonance, with improved sensitivity, which are useful in the experimental conditions, where the usual methods fail.

The project was scientifically successful, as shown by 30 original scientific papers and two chapters in a Springer monography, which we have published during the project timeframe (2009-2012).

More than that, the results obtained have practical use, as they facilitate the use of ^{14}N NQR in various fields, from security applications (e.g. remote detection of hidden explosives), detection of forged drugs, or in the field of pharmaceutical research and quality control. We have managed to obtain full financial support to organize the international »NATO Advanced Research Workshop on Magnetic Resonance detection of Explosives and Illicit Materials« in years 2011 and 2012. Additionally, we cooperate with EU project CONPHIRMER by developing techniques of detecting forged drugs in the original packing. We have also started offering ^{14}N NQR support for developing active pharmaceutical ingredients for a Slovenian pharmaceutical company.

4. Poročilo o realizaciji predloženega programa dela na raziskovalnem projektu³

Tema raziskovanega projekta sta razvoj in uporaba novih metod za detekcijo jedrske kvadrupolne resonance dušikovih atomskih jeder (tudi N-14 "nuclear quadrupole resonance", NQR). Z metodami jedrske kvadrupolne resonance N-14 lahko natančno merimo frekvence prehodov med kvadrupolnimi energijskimi nivoji dušikovih atomskih jeder. Te frekvence so natančno določene s porazdelitvijo električnih nabojev v okolici dušikovega jedra v trdnih snoveh, zato že majhne spremembe strukture snovi bistveno vplivajo na spremembe resonančnih frekvenc. Zato lahko z meritvami N-14 NQR spektrov natančno preverjamo kristalno in molekularno strukturo snovi, spremljamo nastanek vezi, ugotavljamo ali razlagamo strukturne spremembe v snovi (npr. nastanek polimorfnih struktur snovi ali fazne prehode v njih).

V primerjavi z mnogo bolj razširjeno kemijsko analizo metodo jedrske magnetne resonanco ("nuclear magnetic resonance", NMR), je NQR relativno neznan metoda, predvsem zaradi slabše občutljivosti, ter omejenosti na trdne vzorce, ki vsebuje elemente dušika, klora, ali drugih kemijskih elementov s kvadrupolnim jedrom. V zadnjem desetletju pa se povečuje zanimanje za uporabo N-14 NQR. Po eni strani je dušik pogosto prisoten v vrsti znanstveno in industrijsko zanimivih anorganskih in organskih substanc, na primer v farmacevtskih proizvodih ali eksplozivih, kjer je izjemno pomembno določanje kristalne strukture in polimorfizma. Po drugi strani so zelo napredovale računske metode določanja kristalni struktur, ki omogočajo tudi natančne izračune oz. napovedi porazdelitve elektronske gostote v kristalu, kar omogoča tudi izračun "tenzorjev električnega polja na mestu dušikovega jedra" in posledična frekvenc NQR prehodov. Tako NQR postane učinkovita metoda za preverjanje teh modelov.

Nadaljnji razvoj in širšo uporabo metod NQR zavira predvsem nizka občutljivost NQR metode. Laboratorija za jedrsko kvadrupolno in jedrsko dvojno kvadrupolno resonanco na Institutu »Jožef Stefan« spadata med svetovno najboljše in najbolj znane laboratorije, z dolgo tradicijo raziskav na področju NQR. V okviru projekta smo zato razvili izboljšane metode za vzbujanje in detekcijo N-14 signalov, ki omogočajo določanje NQR frekvenc in merjenje NQR spektrov, ali jih tako pospešijo, da postanejo uporabne za različne aplikacije.

1. Razvoj dvojno resonančnih NQR metod v nizkem magnetnem polju, uporaba za študij polimorfizma, vodikovih vezi in faznih prehodov

Analizirali smo možnost dinamične polarizacije protonskih spinov preko dušikovega spinskega sistema N-14 v nizkem magnetnem polju. Tu je hitrost polarizacije protonskega spinskega sistema povezana s verjetnostjo prehodov na časovno enoto med kvadrupolno razcepljenimi nivoji dušika N-14 in Zemansko razcepljenimi nivoji vodika H-1. Eksperimenti, izvedenih na vzorcu 1,3,5-triazin so potrdili napovedi naše teoretične analize. Predlagali smo novo dvojno resonančno metodo za merjenje zelo nizkih NQR frekvenc (100 kHz in nižje). Tehnika je osnovana na periodičnem prehajanju (»cikliranju«) magnetnega polja med visoko in nizko vrednostjo ter opazovanjem protonskega signala v visokem magnetnem polju. V nizkem magnetnem polju pride do resonančne radiofrekvenčne interakcije med kvadrupolnim jedri N-14 in protoni H-1 pri vrednosti magnetnega polja, kjer je izpolnjen resonančni pogoj za Larmorjevo frekvenco $\nu_H = \nu_Q/2$. Kvadrupolna jedra so hkrati vzbujena z resonančnim radiofrekvenčnim poljem v smeri statičnega magnetnega polja. Opisali smo eksperimentalne pogoje in pokazali primere meritev za jedra s spinom $I=1$: dušik N-14 ter devterij H-2.

Uporabili metode dvojne jedrske kvadrupolne resonance (NQDR) z dinamično polarizacijo protonskih spinov preko dušikovega spinskega sistema N-14 v nizkem magnetnem polju. Tu je hitrost polarizacije protonskega spinskega sistema povezana s verjetnostjo prehodov na časovno enoto med kvadrupolno razcepljenimi nivoji dušika N-14 in Zemansko razcepljenimi nivoji vodika H-1.

Razvite metode so izboljšale občutljivost detekcije kvadrupolnih resonanc N-14 in omogočajo določitev lastnih vrednosti tenzorja gradienta električnega polja na mestu jedra atoma N-14, ki so zelo občutljive na lokalno okolico elektronov iz kemijski vezi bližnjih atomov. To lastnost smo s pridom izkoristili za razlikovanje med polimorfnimi strukturami. Raziskovani sistemi so bili piroxica, molekularni kompleks isonicotinamide – oksalna kislina, družina polihalogeniranih benzimidazolov in izbrani derivati iz družine thiadiazolov.

Za študij faznih prehodov in protonske izmenjave v molekularnih agregatih z vodikovo vezjo smo uporabili kombinacijo kvadrupolne resonance ³⁵Cl in N-14. Meritve so omogočile določitev faznega prehoda, aktivacijske energije in odkritje protonske izmenjave v N-H...O vodikovi vezi v visokotemperaturni fazi.

S pomočjo jedrske kvadrupolne resonance dušika N-14 in sipanja Rentgenskih žarkov preverjali ujemanje numeričnih izračunov z gostotno funkcionalno teorijo na izomerih izothioureaz. Izkazalo se je, da so N-14 NQDR spektri dobra indikacija za določevanje tipa izomerov in moči intra- in intermolekularnih N-H...Cl oziroma N-H...Br interakcij. Metoda se je izkazala za primerno za določevanje ekvivalentnosti dušikovih mest, kot jih določa hitrost izmenjave. Posebnosti v strukturi so se izkazale za ključni element visoke biološke aktivnosti posameznih raziskovanih soli.

Posebej koristne so se razvite izboljšave detekcije signala dušikove NQR izkazale pri študiju trdnih snovi z vodikovimi vezmi. Raziskave so vključevale širok spekter trdnih snovi, iz različnih družin feroelektričnih, antiferoelektričnih in paraelektričnih kristalov. Rezultati meritev so pokazali na korelacije med parametri jedrske kvadrupolne resonance in strukturnimi parametri, ki jih lahko uporabimo tudi za določitev lege protona v vodikovi vezi.

2. Razvoj multipulznih in stohastičnih sekvenc za vzbujanje NQR prehodov

Raziskovali smo metode izboljšanja vzbujanja in detekcije NQR signalov N-14. Primarna metoda je bila »spin-lock spin-echo« (SLSE) metoda, ki je primerna predvsem za trdne vzorce s dolgim spin-mrežnim relaksacijskim časom T1 in kratkim spin-spinskim relaksacijskim časom T2, kar je značilno za nekatere vzorce trdnih

dušikovih eksplozivov, npr. TNT.

Raziskali smo frekvenčno odvisnost za amplitude N-14 kvadrupolnih resonančnih črt v polimorfnem TNT za široko področje eksperimentalnih parametrov. Razvili smo teoretični model, ki napoveduje, da se amplitude obnaša kot sinc funkcija, dodatno modulirana v odvisnosti od razmikov med SLSE pulzi. Meritve na vzorcih trinitrotoluena (TNT) in paranitrotoluena (PNT) so povsem potrdile teoretično napoved. Rezultati so takoj uporabni za zmanjšanje števila prostih parametrov pri robustnih modelih za detekcijo TNT eksplozivov s pomočjo jedrske kvadrupolne resonance.

Uspeli smo uspešno vzbuditi in izmeriti signal jedrske kvadrupolne resonance N-14 s stohastičnim vzbujanje. Namesto kratkih in močnih radiofrekvenčnih pulzov, ki zahtevajo močnostni radiofrekvenčni oddajnik moči 100 do 1000 Wattov, smo tu uspeli snov vzbujati z stohastično razporejenimi pulzi, ki niso presegali moči 5 Wattov. Prednosti so očitne, saj je močnostni oddajnik ena najdražjih komponent NQR spektrometra, hkrati pa je edina komponenta, ki je z razvojem miniaturizacije elektronike še ni mogoče zmanjšati in poceniti.

Pomembno je tudi to, da bi bilo z odpravo oddajnika možno načrtovati prenosni NQR spektrometer, ki bi deloval izključno na baterije.

Uspešno smo opravili prve meritve 14-N NQR signalov, vzbujenih z multipulzno WURST-CPMG (wideband uniform rate and smooth truncation) sekvenco. Tu smo namesto običajnih monofrekvenčnih pulzov uporabili šibke radiofrekvenčne pulze, ki se jim med samim pulzom zvezno spreminja frekvenca. Ugotovili smo, da lahko jakost oddajnika zmanjšamo za red velikosti, pri tem pa povečamo pasovno širino vzbujanja. Nova tehnika omogoča iskanje NQR frekvenc v območju 1-5 MHz s šibkim vzbujanjem in z manjšim številom korakov kot doslej.

3. Razvoj metod jedrske kvadrupolne resonance za meritve tankih površinskih plasti.

Razvili popolnoma nov način detekcije signalov NQR. V vseh dosedanjih načinih merjenja se je vzorec nahajal v resonančnem krogu nahajal v tuljavi, ki je s svojim magnetnim poljem povzročala prehode med jedrskimi stanjih raziskovanega atomskega jedra. Ta način je zelo učinkovit, vendar ni primeren za vzorce, ki se nahajajo v obliki tankih plasti, kot so filmi, premazi itd. Dodatna težava je, kadar se te tanke plasti v stiku s prevodno površino, ki običajno onemogoča meritve s tuljavo. Teh težav smo se izognili z razvojem originalne metode detekcije signala v geometriji nihajnega kroga, kjer se vzorec nahaja v ploščatem kondenzatorju. Zanimivo je, da je metoda v limiti zelo tankih vzorcev (npr. premazov) enako občutljiva kot običajna geometrija. Prednost metode je tudi, da je bližina prevodne plasti prednost in ne ovira, saj jo lahko izkoristimo kot eno ploščo kondenzatorja.

4. Dopolnitev metod N-14 NQR za detekcijo eksplozivov za metodo za detekcijo tekočih eksplozivov

Raziskovali smo načine, kako zaobiti eno izmed slabosti metode detekcije skritih eksplozivov z N-14 NQR. Ta metoda, ki jo razvijamo v zadnjih letih je namreč občutljiva samo na trdne vzorce (eksplozive v kristalinični ali amorfni obliki), z njo pa ni možno detektirati tekočih eksplozivov, saj je zaradi hitre rotacije molekul v tekočini kvadrupolna interakcija izpovprečena. Zato smo raziskali možnost razlikovanja eksplozivov in običajnih nenevarnih tekočin z metodo jedrske magnetne resonance (NMR). V kemijskem laboratoriju bi za tako razlikovanje z lahko uporabili NMR spektrometer visoke ločljivosti, nas pa je zanimalo, ali lahko razlikovanje dosežemo tudi z majhnim prenosnim permanentnim magnetom z nehomogenim poljem, kakršnega bi lahko uporabili tudi npr. pri kontroli prtljage na carini ali na letališčih. Pokazali smo, da je tako razlikovanje možno na osnovi razlik spinskih relaksacijski časov posameznih snovi.

5. Posebna pozornost je bila posvečena predstavitvi uporabnosti doseženih rezultatov širši publiki ter iskanju povezav z industrijo, ki bi jih lahko uporabila v praksi.

V času trajanja projekta je projekta skupina v mednarodnih znanstvenih revijah objavila 30 originalnih del, ki se nanašajo na tematiko projekta. Posebej pa se zavedamo, da imajo odlični znanstveni rezultati še poseben pomen, kadar ima do izsledkov dostop širša javnost ter kadar je možno izsledke raziskav uporabiti oziroma se izkažejo koristni tudi v gospodarstvu. Zato smo kot soorganizirali dve mednarodni znanstveni srečanji "Workshop on Magnetic Resonance Detection of Explosives & Illicit Materials (MRDE- 2011 in MRDE-2012)".

NQR metode, ki jih razvijamo, imajo poleg detekcije prepovedanih oziroma nevarnih snovi potencialno pomembno vlogo tudi kot analitske metode za potrebe farmacevtske industrije. Kot izvajalec projekta smo bili povabljeni v evropski projekt CONPHIRMER, kjer razvijamo napravo za odkrivanje ponarejenih zdravil v »originalni« embalaži. Svoje uspehe smo predstavili na več srečanjih s predstavniki farmacevtske industrije v Sloveniji. V letu 2012 smo sklenili prvi dogovor s slovensko farmacevtsko firmo o sodelovanju pri uporabi N-14 NQR pri razvoju novih zdravil.

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

Delo na projektu je potekalo v skladu z načrtom. Osnovna hipoteza projekta je bila, da lahko z razvojem novih tehnik multipulzne »čiste« jedrske kvadrupolne resonance in jedrske dvojne kvadrupolne resonance močno razširimo področje uporabe te spektroskopske metode, tako na področju osnovnih raziskav kot na področju aplikativne uporabe pri detekciji eksplozivov in za uporabo v farmacevtski industriji. Prvi del smo dokazali z 30 objavljenimi znanstvenimi publikacijami, drugi del pa z na novo vzpostavljenim sodelovanjem s slovensko farmacevtsko industrijo.

V nadaljnjem naštejemo nekatere izmed dosežkov:

Razvili smo tehniko dvojne resonance v nizkem magnetnem polju za detekcijo NQR frekvenc kvadrupolnih jeder s spinom $I=1$ (N-14 in H-2). Teoretične napovedi izmerjene polarizacije so se skladale z eksperimentalnimi rezultati na kristalu 1,3,5-triazina. Metode dvojne resonance smo uporabili tudi za določanje elektronske gostote v zdravilu proti levkemiji in multipli sklerozi, pri določanju N-14 resonanc v družini tertazolov, in pri faznih prehodih v piridazin perkloratu ter pri določevanju polimorfizma in vodikovih vezi v molekularnih sistemih in farmacevtskih učinkovinah

Izboljšane tehnike meritev so omogočile poiskati korelacijo med parametri jedrske kvadrupolne resonance in strukturnimi parametri, ki so povezani z lego protonov v vodikovih vezeh. velik napredek je bil dosežen tudi v povezovanju meritev NQR parametrov in numeričnimi izračuni v okviru kvantne teorije atomov in molekul in gostotne funkcionalne teorije.

Z razlago izvenresonačnih učinkov pri neposredni detekciji NQR signalov z multipulznimi sekvencami smo naredili nadaljnji korak k uporabi NQR za detekcijo prepovedanih dušikovih spojin (eksplozivov in drog), saj bomo lahko ta spoznanja vključili v robustne numerične algoritme za detekcijo signalov.

Področje uporabe NQR smo tudi razširili na novo področje tankih plasti na prevodnih površinah. Razvili smo dve tehniki, ki omogočata uporabo dramatično manjših moči za vzbujanje ter detekcijo kvadrupolnih prehodov. Prva tehnika uporablja metodo stohastičnega vzbujanja, pri drugi pa smo uspešno uporabili metodo "vlakovnega vzbujanja" s kombinacijo Carr-Purcell vzbujanja in WURST-oblikovanih pulzov, ki doslej še ni bila uporabljena na primeru kvadrupolne resonance N-14.

V času izvajanja projekta je naša skupina objavila 8 (2009) , 9 (2010) , 6(2011) ter 7(2012) izvirmih znanstvenih člankov, povezanih s tematiko raziskovalnega projekta, sodelovala pri organizaciji dveh mednarodnih znanstvenih delavnic, začela sodelovati pri EU projektu CONPHIRMER ter vzpostavila sodelovanje s farmacevtsko industrijo. Zato ocenjujemo, da je projekt potekal v skladu z načrtom in da je dosegel vse zadane cilje.

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

Med izvajanjem projekta ni bilo sprememb programa ali sestave projektne skupine, razen odhoda mladega podoktorskega sodelavca Andrije Lebarja, ki se je kot raziskovalec zaposlil v slovenskem farmacevtskem podjetju.

7. Najpomembnejši znanstveni rezultati projektne skupine⁶

Znanstveni dosežek			
1.	COBISS ID	2173284	Vir: COBISS.SI
Naslov	SLO	Dvojna resonanca v šibkem magnetnem polju: dinamična polarizacija protonov preko N-14 in meritve nizkih JKR frekvenc	
	ANG	Double resonance experiments in low magnetic field	
Opis	SLO	Analizirali smo možnost dinamične polarizacije protonskih spinov preko dušikovega spinskega sistema N-14 ter izračunali povečanje protonske polarizacije. Ugotovili smo, da je hitrost polarizacije povezana s verjetnostjo prehodov na časovno enoto med kvadrupolnimi nivoji N-14 JKR in Zemanskimi nivoji H-1. Eksperimenti, izvedenih na vzorcu 1,3,5-triazin so potrdili rezultate teoretične analize. Predlagali smo novo dvojno resonanco tehnika za merjenje JKR frekvenc v višini 100 kHz in nižje.	
	ANG	We have analyzed the possibilities of dynamically polarizing proton spin system via the quadrupole 14N spin system. The increase of the proton magnetization was calculated. The proton polarization rate was found to be related to the transition probabilities between the 14N NQR and 1H NMR energy levels. The experiments performed in 1,3,5-triazine confirmed the results of the theoretical analysis. We proposed a new double resonance technique for the measurement of NQR frequencies of the order of 100 kHz and lower.	
Objavljeno v	Academic Press; Journal of magnetic resonance; 2009; Vol. 199; str. 199-207; Impact Factor: 2.531; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.096; Avtorji / Authors: Seliger Janez, Žagar Veselko		
Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek		
2.	COBISS ID	2274660	Vir: COBISS.SI
Naslov	SLO	Študija polimorfizma in vodikovih vezi v molekularne kompleksu isonicotinamide-oksalna kislina (2:1)	
	ANG	14N NQR study of polymorphism and hydrogen bonding in molecular complex isonicotinamide-oxalic acid (2:1)	
Opis	SLO	S tehniko dvojne jedrske kvadrupolne resonance smo izmerili in asignirali celoten spekter 14N jedrske kvadrupolne resonance v dveh polimorfni kristaliničnih fazah molekularnega kompleksa isonicotinamide-oksalna kislina (2:1). Spremembe resonančnih frekvenc smo analizirali z modelom, ki predpostavlja, da dodaten naboj na dušikovem atomu spremeni JKR frekvenco. Rezultati kažejo, da je ta naboj negativen, N...H-O vodikova vez pa delno ionska. Prenos negativnega naboja z dušikovega atoma lahko povzroči ojačanje intra- in inter-verižnih vodikovih vezi, ki jih tvorijo amidne skupine.	
	ANG	The complete 14N NQR spectra have been measured in the two polymorphic crystalline phases of the molecular complex isonicotinamide oxalic acid (2:1) by nuclear quadrupole double resonance. The observed NQR parameters have been assigned to the two nitrogen positions (ring and amide) in a molecule and analyzed in a model, where it is assumed that an additional electric charge on the nitrogen atom changes the NQR parameters. The model suggests that this additional electric charge is negative so that the N H O hydrogen bond seem to be partially ionic, of the type N...H-O.	

	Objavljeno v	American Chemical Society; The journal of physical chemistry; 2010; Vol. 114, issue 45; str. 12083-12087; Impact Factor: 2.732; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 1.977; A': 1; Avtorji / Authors: Seliger Janez, Žagar Veselko	
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek	
3.	COBISS ID	2267236	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Študija vodikovih vezi in polimorfizma v derivatih 1,3,4-thiadiazola s pomočjo jedrske kvadrupolne resonance 14N in jedrske magnetne resonance 1H
		ANG	14N NQR, 1K NMR and DTF/QTAIM study of hydrogen bonding and polymorphism in selected solid 1,3,4-thiadiazole derivatives
	Opis	SLO	Derivate 1,3,4-thiadiazola smo raziskali eksperimentalno v trdnem stanju z dvojno jedrsko kvadrupolno resonanco 1H-14N in teoretično z metodo teorijo gostotnega funkcionala (DFT). Konkretno smo intra in intermolekularne interakcije v derivativih 1,3,4-thiadiazola opisali z mehanizmom QTAIM (kvantna teorija atomov v molekulah)/DFT. Rezultati kažejo da znatne razlike v parametrih kvadrupolne resonance dovoljujejo razlikovanje celo med posameznimi polimornimi oblikami posameznih derivatov in kažejo na močnejše vodikove vezi.
		ANG	The 1,3,4-thiadiazole derivatives have been studied experimentally in the solid state by 1H-14N NQDR spectroscopy and theoretically by Density Functional Theory (DFT). The specific pattern of the intra and intermolecular interactions in 1,3,4-thiadiazole derivatives is described within the QTAIM (Quantum Theory of Atoms in Molecules)/DFT formalism. The results obtained suggest that considerable differences in the NQR parameters permit differentiation even between specific pure association polymorphic forms and indicate that the stronger hydrogen bonds.
	Objavljeno v	Royal Society of Chemistry; PCCP. Physical chemistry chemical physics; 2010; Vol. 12, issue 12; str. 13007-13019; Impact Factor: 3.453; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 1.977; A': 1; Avtorji / Authors: Seliger Janez, Žagar Veselko, Latosińska Jolanta N.	
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek	
4.	COBISS ID	24453927	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Kondenzatorska detekcija jedrske magnetizacije: jedrska kvadrupolna resonanca na površinah
		ANG	Capacitor-based detection of nuclear magnetization
	Opis	SLO	Demonstrirali smo detekcijo signala jedrske kvadrupolne resonance N-14 v novi postavitvi eksperimenta, kjer vzorec ne leži v tuljavi, temveč napolnjuje prostor med ploščama kondenzatorja. Metoda je uporabna za zaznavanje signala iz tankih površin.
		ANG	We have demonstrated the detection of the N-14 nuclear quadrupole resonance signal in an experimental setup, where the sample occupies the space between the capacitor plates instead of the coil as usual. The new technique may be useful for the detection of the NQR signal from thin surface layers.
	Objavljeno v	Academic Press; Journal of magnetic resonance; 2011; Vol. 209, no. 1; str. 79-82; Impact Factor: 2.138; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.255; Avtorji / Authors: Gregorovič Alan, Apih Tomaž, Kvasić Ivan, Lužnik Janko, Pirnat Janez, Trontelj Zvonko, Strle Drago, Mušević Igor	
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek	
5.	COBISS ID	2510948	Vir: COBISS.SI

Naslov	<i>SLO</i>	Novе metode za detekcijo jedrske kvadrupolne resonance 14N
	<i>ANG</i>	New methods for detection of 14 N NQR frequencies
Opis	<i>SLO</i>	Dušikovi atomi so prisotni v večini trdnih eksplozivov ter v mnogih prepovedanih drogah. Jedrsko kvadrupolno resonance (NQR) in relaksacijo dušikovih atomskih jeder 14N lahko uporabimo za karakterizacijo teh snovi, pa tudi za razlikovanje med različnimi polimorfnimi kristaliničnimi oblikami. Po karakterizaciji, lahko NQR uporabljamo za detekcijo teh substanc. NQR spektralne črte lahko merimo s pulzno tehniko NQR, ali z dvojno jedrsko kvadrupolno resonanca 1H-14N NQDR s pomočjo cikliranja magnetnega polja. Predstavljamo več tipov NQDR tehnik, ki so primerne za uporabo pri različnih eksperimentalnih pogojih, ter primere uporabe.
	<i>ANG</i>	Nitrogen atoms are present in a number of solid explosives and illicit substances. The nuclear quadrupole resonance (NQR) spectra and spin-lattice relaxation of the nitrogen atomic nucleus 14N can be used to characterize these compounds and to distinguish between possible crystal polymorphs. After the characteristic 14N NQR frequencies and spin-lattice relaxation rates in a compound are determined, NQR can be used to detect this compounds and, in case of crystal polymorphs, also to determine the method of preparation. The 14N NQR frequencies and spin-lattice relaxation rates are measured either by pulse NQR or by nuclear quadrupole double resonance (NQDR) based on magnetic field cycling. Here, we discuss several 1H-14N NQDR techniques which can be used to measure the 14N NQR frequencies and spin-lattice relaxation rates under various experimental conditions. Some characteristic applications of these techniques are presented and discussed in details.
Objavljeno v		Springer; Applied magnetic resonance; 2012; Vol. 43, iss. 4; str. 469-484; Impact Factor: 0.755; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.255; Avtorji / Authors: Seliger Janez, Žagar Veselko
Tipologija		1.02 Pregledni znanstveni članek

8. Najpomembnejši družbeno-ekonomski rezultati projektne skupine²

Družbeno-ekonomski dosežek		
1.	COBISS ID	22832935 Vir: COBISS.SI
Naslov	<i>SLO</i>	N-14 NQR signali v eksplozivu paranitrotoluenu in eksplozivu TNT
	<i>ANG</i>	N nuclear quadrupole resonance signals in paranitrotoluene and trinitrotoluene
Opis	<i>SLO</i>	Raziskali smo vpliv parametrov vzbujevalne pulzne sekvence na intenzite NQR resonančnih črt eksploziva TNT. rRezultati omogočajo izboljšavo detektorja eksplozivov.
	<i>ANG</i>	We have explored the influence of excitation pulse sequence on the intensities of NQR resonance lines of explosive TNT. The results will help to improve the performance of explosive detector.
Šifra		B.03 Referat na mednarodni znanstveni konferenci
Objavljeno v		Springer; Explosives detection using magnetic and nuclear resonance techniques; 2009; Str. 171-191; Avtorji / Authors: Gregorovič Alan, Apih Tomaž, Lužnik Janko, Pirnat Janez, Trontelj Zvonko
Tipologija		1.16 Samostojni znanstveni sestavek ali poglavje v monografski publikaciji
2.	COBISS ID	23710247 Vir: COBISS.SI
Naslov	<i>SLO</i>	Nizkofrekvenčni NQR

		ANG	Low frequency NMR
	Opis	SLO	Razvili smo NQR spektrometer, ki omogoča občutljive 14N NQR meritve v območju 0.1 MHz do 15 MHz. Naprava je bolj fleksibilna od spektrometrov, ki so dobavljivi na trgu, in nam omogoča hiter razvoj novih načinov NQR meritev.
		ANG	We have developed low frequency (0.1 - 15 MHz) NQR spectrometer. Our device is more flexible than the spectrometers, available on the market, and enables us to develop new types of NQR measurement rapidly.
	Šifra	B.03 Referat na mednarodni znanstveni konferenci	
	Objavljeno v	2010; Avtorji / Authors: Apih Tomaž	
	Tipologija	3.15 Prispevek na konferenci brez natasa	
3.	COBISS ID	25387303	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Širokopasovno vzbujanje pri jedrski kvadrupolni resonanci N-14
		ANG	Broadband 14N nuclear quadrupole resonance excitation
	Opis	SLO	Predstavljena sta dva nova načina vzbujanja pri jedrski kvadrupolni resonanci N-14: stohastično vzbujanje in vzbujanje s Carr-Purcell "vlakovno sekvenco", kjer se se frekvenca vzbujevalnim pulzom zvezno spreminja. Prednosti novih metod sta zmanjšanje potrebne moči ter povečanje pasovne širine vzbujanja.
		ANG	We present two novel approaches to the N-14 nuclear quadrupole resonance transition excitation: stochastic excitation and Carr-Purcell-like train excitation with frequency swept pulses. The advantages of the novel methods are reduction of the necessary power of the excitation pulses and broadband excitation.
	Šifra	B.04 Vabljen predavanje	
	Objavljeno v	s. n.]; Program & abstract book; 2011; Str. 11; Avtorji / Authors: Gregorovič Alan, Apih Tomaž	
	Tipologija	1.12 Objavljeni povzetek znanstvenega prispevka na konferenci	
4.	COBISS ID	24807463	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Cikliranje magnetnega polja pri detekciji kvadrupolne resonance
		ANG	Magnetic field cycling and quadrupole resonance detection
	Opis	SLO	Predstavljeni so trije tipi cikliranja magnetnega polja, ki imajo ključno vlogo pri ojačanju signala jedrske kvadrupolne resonance N-14, ali pa jih uporablja pri jedrski dvojni kvadrupolni resonanci.
		ANG	Three types of magnetic field cycling are presented, for use in polarisation enhanced nuclear quadrupole resonance experiment, or for nuclear quadrupole double resonance experiment.
	Šifra	B.04 Vabljen predavanje	
	Objavljeno v	s. n.]; Program and abstracts; 2011; Avtorji / Authors: Apih Tomaž, Gregorovič Alan	
	Tipologija	1.12 Objavljeni povzetek znanstvenega prispevka na konferenci	
5.	COBISS ID		Vir: vpis v poročilo
	Naslov	SLO	Magnetic resonance detection of explosives and illicit materials, MRDE 2012 : NATO Advanced Research Workshop (ARW)
		ANG	Magnetic resonance detection of explosives and illicit materials, MRDE 2012 : NATO Advanced Research Workshop (ARW)
	Opis	SLO	Organizirali smo mednarodno delavnico o uporabi jedrske kvadrupolne resonance za daljinsko detekcijo nevarnih snovi in eksplozivov. Sredstva za pokritje stroškov celotne delavnice in vseh udeležence smo pridobili v

		okviru NATO Advanced Research Workshop.
	ANG	We have organized and international workshop on the NQR remote detection of explosives and illicit materials, and secured sponsorship within the frame of "NATO Advanced Research Workshop Programme"
Šifra	B.01	Organizator znanstvenega srečanja
Objavljeno v		Magnetic resonance detection of explosives and illicit materials, MRDE 2012 : NATO Advanced Research Workshop (ARW), 2-6 September 2012, Izmir, Turkey : program & abstract book. [S. l.: s. n.], 2012
Tipologija	2.30	Zbornik strokovnih ali nerecenziranih znanstvenih prispevkov na konferenci

9. Drugi pomembni rezultati projektne skupine⁸

V laboratoriju za NQR razvijamo spektrometer za NQR, ki deluje na osnovi PC platforme in uporablja v laboratoriju razvito programsko opremo. To nam omogoča večjo prožnost ter hitrejši razvoj novih pulznih sekvenc, načinov zajemanja in obdelav meritev.

10. Pomen raziskovalnih rezultatov projektne skupine⁹

10.1. Pomen za razvoj znanosti¹⁰

SLO

Merjenje kvadrupolne sklopitve N-14 je pomembno tako s stališča bazične znanosti kot s stališča uporabe. V okviru opravljenih raziskav smo razvili novo tehniko za določanje izjemno šibkih kvadrupolnih sklopitev z uporabo dinamične protonske polarizacije, kar bo omogočilo meritve na sistemih, kjer do sedaj še niso bil praktično izvedljive. Ta napredek na eksperimentalnem področju je še posebej pomemben zato, ker lahko v istem času opazimo velik napredek v računskih metodah in simulacijah trdnih snovi, kar omogoča eksperimentalno preverjanje teoretičnih modelov.

Teoretično smo tudi razložili obnašanje spinske polarizacije pri uporabi multipulznih sekvenc, kar bo omogočilo razvoj novih algoritmov za detekcijo zašumljenih signalov. Razvili smo tudi metodo in posebno obliko sonde, ki omogoča meritve z jedrsko kvadrupolno resonanco na tankih vzorcih na prevodnih površinah, kar bo v prihodnjem še povečalo uporabnost metode.

ANG

The measurements of nuclear quadrupole coupling constants $14N$ are important from the standpoint of basic science as well as for applications. We have developed a new technique for the determination of very weak quadrupole coupling constants by using dynamic proton polarization. This should enable measurements on systems, which have not been accessible by the standard NQR methods. This advance in the experimental field is even more important due to the simultaneous advance of computational methods in the solid-state systems. This allows for a direct experimental verification of theoretical models by NQR.

We have theoretically explained the off-resonance effects when using multipulse excitation techniques. This should enable the development of even more efficient algorithms for the robust extraction of signals from noise.

We have also developed a new method a new probe, which enables the NQR measurements on thin layers on conducting surfaces. This should further widen the range of applicability of our method.

10.2. Pomen za razvoj Slovenije¹¹

SLO

Rezultati raziskovalnega programa so:

- nova občutljiva dvojno resonančna metoda za določevanje kvadrupolnih resonančnih frekvenc

- izboljšanje občutljivosti detekcije dušikovih snovi (npr prepovedanih drog ali eksplozivov)
- metoda za merjenje signalov jedrske kvadrupolne resonance v tankih plasteh na prevodnih površinah

Rezultati imajo izrazito aplikativno uporabnost na sledečih področjih:

1. Identifikacija polimorfnih struktur:

NQR je zelo selektivna spektroskopija zato imajo polimorfne oblike snovi običajno zelo različne resonančne frekvence, in je zato v vzorcu (ki je lahko v prašni obliki) možno določiti deleže posameznih oblik. To kaže na možno uporabo metode v farmacevtski industriji.

2. Kvalitativna in kvantitativna analiza:

Intenziteta JKR signala je sorazmerna količini vzorca v dani obliki. Dodatne primesi običajno ne spremenijo resonančnih frekvenc.

3. Detekcija in kontrola kvalitete na vseh stopnjah proizvodnje:

Z metodo NQR so možne izvedbe meritev, kjer se vzorec ne nahaja v spektrometru, temveč izven njega. Tako je možno npr. meriti JKR signal učinkovine na proizvodni liniji, ali nedestruktivno preveriti vsebino zaprtih škatel tablet.

4. Napredek v metodah JKR je neposredno uporaben tudi na področju daljinske detekcije dušikovih spojin, kot so prepovedane droge in eksplozivi, ki jo v okviru slovenskih in mednarodnih projektov razvija skupina na IJS.

Razvite analitske metode so na voljo slovenski farmacevtski industriji in bodo potencialno povečevale njeno konkurenčno prednost. Pričakujemo tudi pomemben napredek pri daljinski detekciji eksplozivov, kar lahko vodi k razvoju novih naprav za civilno in vojaško uporabo.

ANG

The results of the research program include:

- a new and more sensitive double resonance method for the detection of quadrupole resonance frequencies
- as improvement of the detection of nitrogen based substances (such as forbidden drugs or explosives) by NQR.
- new way of measuring NQR signal originating from thin layers on conducting surfaces

We expect that the results will find their use in the pharmaceutical analysis in the following areas:

1. Identification of polymorphic structures

The ^{14}N NQR spectroscopy is extremely selective. The polymorphic structures often exhibit quite separated resonance frequencies and which enables to determine the proportions of various phases even in the powder form.

2. Qualitative and quantitative analysis

The intensity on NQR signal is proportional to the quantity of the sample in the given form. Additional ingredients in the sample usually don't modify the resonance frequencies.

3. Detection and quality control in all production stages

NQR does not require magnet, so remote measurements are quite possible. For example, it should be possible to nondestructively check the presence of a drug in an unopened box of tablets.

4. The development of NQR methods can be directly used also in the field of remote detection of illicit substances, illegal drugs and explosives, which is being actively developed by the J. Stefan Institute group.

The developed analytical methods are available to the Slovenian pharmaceutical industry which will potentially improve its competitive advantage. We also expect a significant improvement for the remote detection of explosives, which could lead to explosive detection devices for military and civil use.

11. Samo za aplikativne projekte in podoktorske projekte iz gospodarstva!

Označite, katerega od navedenih ciljev ste si zastavili pri projektu, katere konkretne rezultate ste dosegli in v kakšni meri so doseženi rezultati uporabljeni

Cilj	
F.01	Pridobitev novih praktičnih znanj, informacij in veščin
	Zastavljen cilj <input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE

	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.02	Pridobitev novih znanstvenih spoznanj	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.03	Večja usposobljenost raziskovalno-razvojnega osebja	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.04	Dvig tehnološke ravni	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.05	Sposobnost za začetek novega tehnološkega razvoja	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.06	Razvoj novega izdelka	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.07	Izboljšanje obstoječega izdelka	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.08	Razvoj in izdelava prototipa	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.09	Razvoj novega tehnološkega procesa oz. tehnologije	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.10	Izboljšanje obstoječega tehnološkega procesa oz. tehnologije	

	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.11	Razvoj nove storitve	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.12	Izboljšanje obstoječe storitve	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.13	Razvoj novih proizvodnih metod in instrumentov oz. proizvodnih procesov	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.14	Izboljšanje obstoječih proizvodnih metod in instrumentov oz. proizvodnih procesov	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.15	Razvoj novega informacijskega sistema/podatkovnih baz	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.16	Izboljšanje obstoječega informacijskega sistema/podatkovnih baz	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.17	Prenos obstoječih tehnologij, znanj, metod in postopkov v prakso	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.18	Posredovanje novih znanj neposrednim uporabnikom (seminarji, forumi, konference)	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>

	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.19	Znanje, ki vodi k ustanovitvi novega podjetja ("spin off")	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.20	Ustanovitev novega podjetja ("spin off")	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.21	Razvoj novih zdravstvenih/diagnostičnih metod/postopkov	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.22	Izboljšanje obstoječih zdravstvenih/diagnostičnih metod/postopkov	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.23	Razvoj novih sistemskih, normativnih, programskih in metodoloških rešitev	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.24	Izboljšanje obstoječih sistemskih, normativnih, programskih in metodoloških rešitev	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.25	Razvoj novih organizacijskih in upravljavskih rešitev	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.26	Izboljšanje obstoječih organizacijskih in upravljavskih rešitev	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.27	Prispevek k ohranjanju/varovanje naravne in kulturne dediščine	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE

	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.28	Priprava/organizacija razstave	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.29	Prispevek k razvoju nacionalne kulturne identitete	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.30	Strokovna ocena stanja	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.31	Razvoj standardov	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.32	Mednarodni patent	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.33	Patent v Sloveniji	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.34	Svetovalna dejavnost	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.35	Drugo	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>

Komentar

--

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

	Vpliv	Ni vpliva	Majhen vpliv	Srednji vpliv	Velik vpliv	
G.01	Razvoj visokošolskega izobraževanja					
G.01.01.	Razvoj dodiplomskega izobraževanja	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.01.02.	Razvoj podiplomskega izobraževanja	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.01.03.	Drugo: <input type="text"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02	Gospodarski razvoj					
G.02.01	Razširitev ponudbe novih izdelkov/storitev na trgu	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.02.	Širitev obstoječih trgov	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.03.	Znižanje stroškov proizvodnje	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.04.	Zmanjšanje porabe materialov in energije	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.05.	Razširitev področja dejavnosti	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.06.	Večja konkurenčna sposobnost	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.07.	Večji delež izvoza	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.08.	Povečanje dobička	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.09.	Nova delovna mesta	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.10.	Dvig izobrazbene strukture zaposlenih	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.11.	Nov investicijski zagon	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.12.	Drugo: <input type="text"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.03	Tehnološki razvoj					
G.03.01.	Tehnološka razširitev/posodobitev dejavnosti	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.03.02.	Tehnološko prestrukturiranje dejavnosti	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.03.03.	Uvajanje novih tehnologij	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.03.04.	Drugo: <input type="text"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.04	Družbeni razvoj					
G.04.01	Dvig kvalitete življenja	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.04.02.	Izboljšanje vodenja in upravljanja	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.04.03.	Izboljšanje delovanja administracije in javne uprave	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.04.04.	Razvoj socialnih dejavnosti	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.04.05.	Razvoj civilne družbe	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.04.06.	Drugo: <input type="text"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.05.	Ohranjanje in razvoj nacionalne naravne in kulturne dediščine in	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	

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

Komentar

--

13.Pomen raziskovanja za sofinancerje¹²

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

14.Izjemni dosežek v letu 2012¹³**14.1. Izjemni znanstveni dosežek**

A comparative study of the hydrogen-bonding patterns and prototropism in solid 2-thiocytosine (potential antileukemic agent) and cytosine, as studied by 1H-14N NQDR and QAIM/ DFT

JN Latosińska, J Seliger, V Žagar, DV Burchardt
Journal of Molecular Modeling, 18 (2012) 11

Predstavljene so prednosti kombinacije meritev z jedrsko kvadrupolno resonanco in modeliranja z gostotno funkcionalno teorijo. Pridobili smo podrobne informacije o lastnosti kompleksne mreže vodikovih vezi v kristalu potencialne anti-levkemične učinkovine 2-thiocytosine (2-TC). Raziskovane lastnosti imajo pomemben vpliv na stabilnost in reaktivnost preučevanih učinkovin.

14.2. Izjemni družbeno-ekonomski dosežek

--

C. IZJAVE

Podpisani izjavljam/o, da:

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

Podpisi:

*zastopnik oz. pooblaščen oseba
raziskovalne organizacije:*

in

vodja raziskovalnega projekta:

Institut "Jožef Stefan"

Tomaž Apih

ŽIG

Kraj in datum:

Ljubljana	13.3.2013
-----------	-----------

Oznaka prijave: ARRS-RPROJ-ZP-2013/16

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

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

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

⁴ Realizacija raziskovalne hipoteze. Največ 3.000 znakov vključno s presledki (približno pol strani, velikost pisave 11) [Nazaj](#)

⁵ V primeru bistvenih odstopanj in sprememb od predvidenega programa raziskovalnega projekta, kot je bil zapisan v predlogu raziskovalnega projekta oziroma v primeru sprememb, povečanja ali zmanjšanja sestave projektne skupine v zadnjem letu izvajanja projekta, napišite obrazložitev. V primeru, da sprememb ni bilo, to navedite. Največ 6.000 znakov vključno s presledki (približno ena stran, velikost pisave 11). [Nazaj](#)

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

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

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

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

⁸ Navedite rezultate raziskovalnega projekta iz obdobja izvajanja projekta (do oddaje zaključnega poročila) v primeru,

da katerega od rezultatov ni mogoče navesti v točkah 7 in 8 (npr. ker se ga v sistemu COBISS ne vodi). Največ 2.000 znakov, vključno s presledki. [Nazaj](#)

⁹ Pomen raziskovalnih rezultatov za razvoj znanosti in za razvoj Slovenije bo objavljen na spletni strani: <http://sicris.izum.si/> za posamezen projekt, ki je predmet poročanja [Nazaj](#)

¹⁰ Največ 4.000 znakov, vključno s presledki [Nazaj](#)

¹¹ Največ 4.000 znakov, vključno s presledki [Nazaj](#)

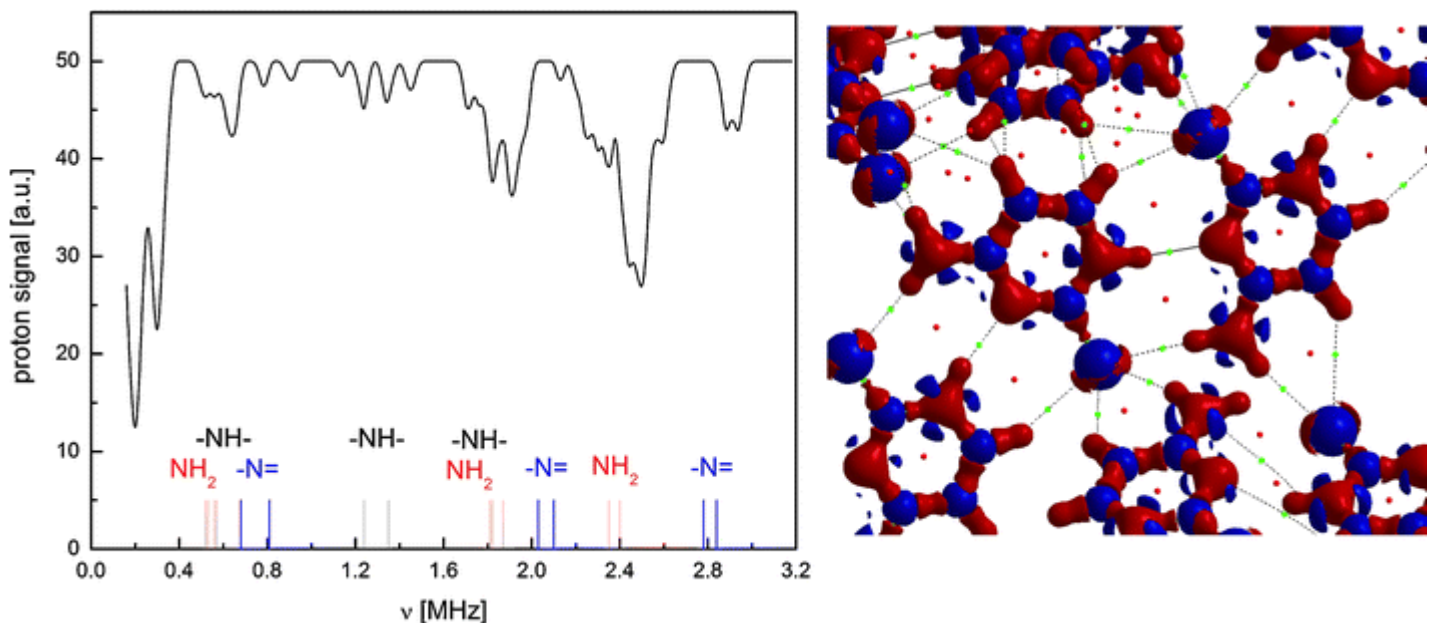
¹² Rubrike izpolnite / prepisite skladno z obrazcem "izjava sofinancerja" <http://www.arrs.gov.si/sl/progproj/rproj/gradivo/>, ki ga mora izpolniti sofinancer. Podpisan obrazec "Izjava sofinancerja" pridobi in hrani nosilna raziskovalna organizacija – izvajalka projekta. [Nazaj](#)

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

Obrazec: ARRS-RPROJ-ZP/2013 v1.00

31-35-FB-77-AC-C9-7D-DE-30-AB-F0-5D-69-B2-B0-12-87-64-41-13

Študija mreže vodikovih vezi z dvojno kvadrupolno resonanco in kvantno teorijo molekul



A comparative study of the hydrogen-bonding patterns and prototropism in solid 2-thiocytosine (potential antileukemic agent) and cytosine, as studied by ^1H - ^{14}N NQDR and QAIM/ DFT

JN Latosińska , J Seliger, V Žagar, DV Burchardt
Journal of Molecular Modeling, **18** (2012) 11

Predstavljene so prednosti kombinacije meritev z jedrsko kvadrupolno resonanco in modeliranja z gostotno funkcionalno teorijo. Pridobili smo podrobne informacije o lastnosti kompleksne mreže vodikovih vezi v kristalu potencialne anti-levkemične učinkovine 2-thiocytosine (2-TC). Raziskovane lastnosti imajo pomemben vpliv na stabilnost in reaktivnost preučevanih učinkovin.

