

Oznaka poročila: ARRS_ZV_RPROG_ZP_2008/619

ZAKLJUČNO POROČILO O REZULTATIH RAZISKOVALNEGA PROGRAMA V OBDOBJU 2004-2008

A. PODATKI O RAZISKOVALNEM PROGRAMU

1. Osnovni podatki o raziskovalnem programu

Šifra programa	P1-0201
Naslov programa	Fizikalna kemija
Vodja programa	2563 Vojeslav Vlachy
Obseg raziskovalnih ur	29.750
Cenovni razred	C
Trajanje programa	01.2004 - 12.2008
Izvajalke programa (raziskovalne organizacije in/ali koncesionarji)	103 Univerza v Ljubljani, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo

B. REZULTATI IN DOSEŽKI RAZISKOVALNEGA PROGRAMA

2. Poročilo o realizaciji programa raziskovalnega programa¹

Naše raziskave prispevajo k razumevanju fizikalno-kemijskih procesov, ki se dogajajo v živih bitjih in/ali so pomembni v industriji. Zanimajo nas raztopine in suspenzije nanodelcev, predvsem polielektrolitov. Nekateri od njih so biološko pomembni (proteini in DNK), drugi, na primer, površinsko aktivne snovi in sintetični polielektroliti pa se na široko uporabljajo v industriji. Raziskave stabilnosti proteinov in DNK, vezave ligandov na DNK in podobnosti molekul so pomembne v farmacevtski industriji in bioinženirstvu; prav na teh področjih sodelujemo tudi z industrijo. Eksperimentalne raziskave se dopolnjujejo s teoretičnimi; namen našega dela je boljše razumevanje procesov na molekularnem nivoju in posredovanje tega znanja študentom ter kolegom v industriji. V času trajanja programa smo objavili 141 člankov v uglednih znanstvenih revijah, kot so Annu. Rev. Biophys. Biomol. Struc. (IF:16,2; od l. 2005 56 neodvisnih citatov), Biochemistry&Molecular biol. (IF:13,3), J. Am. Chem. Soc. (IF:7,9), Nucleic Acids Res., (IF: 6.95), J. Biol. Chem. (IF: 5.8), Curr. Opin. Coll. Interface Sci. (IF:5,3), J. Phys. Chem B, J. Chem. Phys., Langmuir, Chem. Phys. Letters in druge. Objavili smo tudi tri prispevke v monografskih publikacijah. Zaradi pomanjkanja prostora smo v nadaljevanju navedli le nekatera dela. Citiranje je v skladu z bibliografijo navedeno v Sicrisu za obdobje od leta 2004 do 2008: <http://sicris.izum.si/search/prg.aspx?lang=slv&id=3579>.

1. Teoretične in eksperimentalne raziskave disperznih sistemov. Z računalniško simulacijo Monte Carlo, teorijo na osnovi gostotnega funkcionala ter z integralnimi enačbami smo proučevali lastnosti modelnih tekočin v homogenih sistemih ter pod vplivom zunanega polja [21,22,47,57,62-64,79,81,92,112,120]. Z metodo ozkokočnega rentgenskega sipanja in dinamičnega sipanja laserske svetlobe smo raziskovali strukturne in dinamične lastnosti samo-organiziranih sistemov [6,10, 52, 55], biološko pomembnih sistemov [5, 33, 43], strukturiranih topil [71, 91] in gelirnih polisaharidov [114]. Študirali smo (in-vitro) sproščanje modelne učinkovine iz mikroemulzije [18,52]. Glej tudi: M. Tomšič in A. Jamnik, *Simple Alcohols and their Role in Structure and Interactions of Microemulsion Systems* (poglavje 6), ter M. Gašperlin in M. Bešter-Rogač, *Physicochemical Characterization of Pharmaceutically Applicable Microemulsions: Tween 40/Imwitor 308/Isopropyl Myristate/Water* (poglavje 10), Fanun, M. (Ed.) *Microemulsions: Properties and Applications*, CRC Press, Taylor & Francis, 2008. Raziskovali smo [9,39,72,75,93] porazdelitev ionov med nanoporoznoznim adsorbentom in nemoteno raztopino.

2. Elektroliti in polielektroliti [156]. Ugotovili smo, da v vodni raztopini sulfatov dvovalentnih kovin obstajajo tri vrste ionskih parov [26, 90, 99,110]. Pri študiju heksakarboksilne benzenove kisline in njenih kislih ter nevtralnih soli smo uporabili Quint-Viallard enačbe za opis disociacijskih in hidroliznih ravnotežij [58]. Raziskovali smo lastnosti vodnih raztopin nabitih alkalijskih fullereneheksamalonatov [42,87,117,119]. Izmerili

smo osmozni tlak in razredčilne toplote raztopin [95] polianetolesulfonske kisline in njenih alkalijskih soli. Z določanjem koncentracijske odvisnosti razredčilnih entalpij poliglutaminske kisline smo raziskali konformacijski prehod med vijačnico in klobčičem [29]. Če raztopini elektrolita dodamo polielektrolit se reakcija med protioni močno pospeši. Ta efekt, smo teoretično raziskali v delih [31,40,84,101,111]. Med teoretičnimi raziskavami so pomembne simulacije raztopin verižnih polielektrolitov [54], kjer smo raziskali korelacijo med dolžino polielektrolita in osmoznim tlakom, študij interakcije med paličastimi protioni in sferičnimi polioni [118] in vpliv dielektrične nezveznosti [133] na interakcijo med koloidi. Študirali smo vpliv stereoregularnosti na lastnosti polimetakrilne kisline. Pokazali smo [11,37,73,94,143], da stereoregularna sestava vpliva na termodinamične lastnosti PMA.

3. Površinsko aktivne snovi (PAS). Študirali smo interakcije med PAS in nasprotno nabitimi polielektroliti ali poliamfoliti, nasprotno nabitimi derivati fullerena in fosfolipidnimi membranami [25,32,59,69,74,89,97]. Za določitev stopnje vezanja smo uporabili PAS ion-selektivne membrane. Z merjenjem električne prevodnosti vodnih raztopin alikiltrimetilamonijevih kloridov z različno dolžino alkilne verige smo proučevali proces micelizacije [60,88,121].

4. Industrijsko pomembni topljenci. Soli cikloheksilsulfaminske kisline, kalijev acesulfam in natrijev saharin so umetna sladila. Z merjenjem električne prevodnosti smo ugotovili, da so le-ta v vodi popolnoma ionizirana kar verjetno vpliva na interakcije z receptorji okusa [30,41,122]. V razredčenih vodnih raztopinah penicilin G natrijeve in kalijeve soli ter penicilin V kalijeve soli kažejo lastnosti kislinskih soli dvobaznih kislin [96].

5. Hidratacija preprostih in sestavljenih topljencev [3,128,133]. Raziskovali smo hidratacijo ionov in nepolarnih delcev [8,36,76, 85,86]. Uporabili smo metodo Monte Carlo, molekulske dinamike (MD) in teorije na osnovi Wertheimove Ornstein-Zernike integralske enačbe. Študirali smo vedenje modelne vode v zaprtih sistemih [56]. Raziskovali smo hidratacijo polielektrolitov [78]. V delu [107] smo uporabili metodo MD, da bi raziskali vpliv vrste iona na interakcijo med kvarternim dušikom na oligomeru ionena in protioni v raztopini.

6. Kvantna kemija in molekulska podobnost. Interakcijo molekule netropsina z DNK, smo obravnavali s simulacijo dinamike molekul [20, 28]. Pri vezavi netropsina in distamicina v ožji kanal DNK [34] pa smo študirali pomembnost spremembe konfiguracione entropije. Na področju molekulske podobnosti smo razvili nove deskriptorje na osnovi primerjave indirektnih (RDF) zapisov molekul [12, 61]. Sodelovali smo pri razvoju učinkovin zoper kolero [65,77,135].

7. Raziskave biološko pomembnih molekul [134]. Prispevali smo k razlagi pojavov na področju molekulskega prepoznavanja nukleinskih kislin z majhnimi molekulami [126]. Na osnovi študija interakcij protein-protein in protein-DNA smo objavili pregled odkritij s področja bakterijske celične smrti [134]. Uspeli smo povezati termodinamiko razvitja fleksibilnega (nativno nerazvitega) proteina z celično smrtno pri bakterijah [19]. V drugem primeru smo raziskali povezavo med termodinamiko in strukturnimi lastnostmi eritropoietina [14]. Razlage zapletenih biomolekularnih procesov temeljijo na modelih, ki smo jih preverjali na procesu micelizacije površinsko aktivne snovi [60]. Uspelo nam je izdelati model, ki s samo pozitivnimi aktivacijskimi energijami za vse elementarne reakcije, uspešno opiše zvijanje in razvijanje nekaterih G-kvadrupleksov [124]. V nizu teoretičnih in eksperimentalnih del smo določali lastnosti mešanic proteinov z navadnim elektrolitom oziroma z nevtralnimi polimeri [43,53,83]. Določili smo topnost lizocima v prisotnosti nekaterih soli in PEG [106].

8. Kristalizacija. Obarjanje nekaterih industrijsko pomembnih produktov smo raziskali v delih [1,24,49].

3. Ocena stopnje realizacije zastavljenih raziskovalnih ciljev²

Cilji so bili celoti realizirani.

4. Utemeljitev morebitnih sprememb programa raziskovalnega programa³

Sprememb ni.

5. Najpomembnejši znanstveni rezultati programske skupine⁴

Znanstveni rezultat			
1.	Naslov	SLO	DILL, Ken A., TRUSKETT, Thomas Michael, VLACHY, Vojko, HRIBAR, Barbara »Modeli vode, hidrofobni efekt in solvatacija ionov«
		ANG	DILL, Ken A., TRUSKETT, Thomas Michael, VLACHY, Vojko, HRIBAR, Barbara »Modeling water, the hydrophobic effect, and ion solvation«
	Opis	SLO	Omenjeni članek, ki smo ga napisali na povabilo urednikov revije predstavlja pregled naših študij na področju solvatacije v vodnih raztopinah. S preprostim dvodimenzionalnim modelom vode, ki imitira vse glavne lastnosti prave vode, smo uspeli pojasniti hidrofobne interakcije, vpliv ionov na strukturo vode in nenazadnje Hofmeisterovo vrsto, ki je osnova za obarjanje

			proteinov v vodi. Naš cilj je bil uporabiti ta enostaven model in razviti bolj analitično teorijo, ki bi jo lahko uporabili pri študiju hidratacije biomolekul.
		ANG	The paper was written on the invitation of the editors of the Annual Reviews of Biophysics and Biomolecular Structure and represents the review of our studies of the aqueous solvation. Using a simple two-dimensional water model we managed to explain the hydrophobic interaction, the influence of ions to the water structure and the Hofmeister series, which is the basis for the protein precipitation from water solutions. The aim of our work is to develop and apply simple models, which can be used to study hydration in biological systems.
	Objavljeno v		Annu. Rev. Biophys. Biomol. Struct., 2005, vol. 34, str. 173-199, graf. prikazi. JCR IF: 16.175, biophysics; 1/65.
	Tipologija		1.02 Pregledni znanstveni članek
	COBISS.SI-ID		26692357
2.	Naslov	SLO	BUTS, Lieven, LAH, Jurij, DAO-THI, Minh-Hoa, WYNS, Lode, LORIS, Remy. »Toksin-antitoksin moduli kot urejevalci metaboličnega stresa«
		ANG	BUTS, Lieven, LAH, Jurij, DAO-THI, Minh-Hoa, WYNS, Lode, LORIS, Remy. »Toxin-antitoxin modules as bacterial metabolic stress managers«
	Opis	SLO	Pri bakterijah je celična smrt programirana preko genetskih sistemov imenovanih moduli toksin-antitoksin, ki omogočajo celici, da pri določenih fizioloških pogojih sprejme odločitev o življenju ali smrti. Gornji članek obsega do sedaj najbolj podroben pregled raziskav molekularnih mehanizmov bakterijske celične smrti. Naš prispevek na tem področju obsega strukturno karakterizacijo molekul in termodinamske raziskave njihovega zvitja ter medsebojnega prepoznavanja. Znanje o molekularnih silah, ki programirajo celično smrt pri bakterijah, naj bi omogočilo načrtovanje nove generacije antibiotikov.
		ANG	In bacteria the cell death is programmed through the genetic systems known as toxin-antitoxin modules which enable the cell to take that decision at certain physiological conditions. The paper gives a most detailed review of studies of the molecular mechanisms that program bacterial cell death. Our contribution was to determine the structure of the molecules and the thermodynamics of their folding and recognition. This is of extreme importance for understating the bacterial cell death at the molecular level which will enable the development of the new generation of antibiotics in the future.
	Objavljeno v		Trends Biochem. Sci. (Regul. ed.). [Regular ed.], 2005, vol. 30, no. 12, str. 672-679, Graf. prikazi. JCR IF: 13.343, biochemistry & molecular biology; 8/261.
	Tipologija		1.02 Pregledni znanstveni članek
	COBISS.SI-ID		27110405
3.	Naslov	SLO	TOMŠIČ, M, et al Neionski surfaktant Brij 35 v vodi in v različnih alkoholih: Strukturna karakterizacija z metodami sipanja
		ANG	TOMŠIČ, M, et al »Nonionic Surfactant Brij 35 in Water and in Various Alcohols: Structural Investigations by Scattering Methods«
	Opis	SLO	V tem delu je bila predstavljena strukturna raziskava binarnih raztopin neionskega surfaktanta Brij 35 v vodi in v različnih primarnih alkoholih z uporabo ozkokotnega rentgenskega sipanja ter dinamičnega sipanja laserske svetlobe. Rezultati analiz meritev sipanja so bili velikost, oblika in notranja struktura micelov, ki nastanejo z združevanjem molekul Brij 35 v vodi ter v alkoholih. Rezultati tega dela so imeli pomemben vpliv na nadaljne raziskave bolj zapletenih ternarnih sistemov Brij 35/voda/alkohol(i), ki se lahko uporabljajo kot reakcijski mediji pri biokatalitskih sintezah aldehydov.
		ANG	In this study small-angle X-ray scattering and dynamic light scattering techniques were used to explore the structural properties of nonionic surfactant Brij 35 in water and in various primary alcohols. Analysis of the experimental data revealed the size, shape and inner structure of the aggregates resulting from self-organization of Brij 35 molecules in water and in alcohols. Results of this study had significant impact to further structural investigations of more complicated Brij 35/water/alkohol(s) ternary systems, which can be used as reaction media in biocatalytic synthesis of aldehydes.
	Objavljeno v		J. phys. chem., B Condens. mater. surf. interfaces biophys., 2004, vol. 108, no. 22, str. 7021-7032.

Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek	
COBISS.SI-ID		25964293	
4.	Naslov	SLO KOGEJ, K. Študij vpliva gostote naboja na poliionu na lastnosti kompleksov poliakrilne kisline in alkilpiridinijevih surfaktantov	
		ANG KOGEJ K. Study of the effect of polyion charge density on structural properties of complexes between polyacrylic acid and alkylpyridinium surfactants	
	Opis	SLO Z metodo sipanja X-žarkov smo študirali strukturne lastnosti kompleksov med poliakrilatnim anionom in kationskim površinsko aktivnim snovmi (PAS) pri raznih stopnjah nevtralizacije poliiona (PE) in pri konstantnem molskem razmerju med PAS in polimerom. Sipalne krivulje kažejo na veliko stopnjo urejenosti v kompleksih med PAS in PE. Osnoven način urejevanja PAS je v obliki micelnih agregatov, ki se naknadno urejajo v kubično mrežo tipa Pm3n. Pokazali smo, da sta način urejanja in karakteristična razdalja v agregatih odvisna od dolžine verige molekule PAS in od gostote naboja na PE.	
		ANG Structural properties of complexes between poly(acrylate) anion and cationic surfactants (S) were investigated by SAXS at various degrees of neutralization of the polyion (PE) and at a fixed surfactant to PE molar ratio. One broad or several sharp peaks were observed in scattering curves that point to a high degree of order in complexes. The fundamental type of organization of S is in the form of polymer-induced micelles, which can be further arranged in a Pm3n cubic lattice. The type of ordering and the characteristic distance in complexes depend on S chain-length and on PE charge density.	
	Objavljeno v		J. phys. chem., B Condens. mater. surf. interfaces biophys., 2003, vol. 107, no. 32, str. 8003-8010
	Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek
COBISS.SI-ID		25294853	
5.	Naslov	SLO Strukturne raznolikosti G-kvadrupleksov kot kinetični pojav	
		ANG Diverse polymorphism of G-quadruplexes as a kinetic phenomenon	
	Opis	SLO G-kvadruplekse lahko raziskujemo le z združevanjem strukturnih, termodinamskih in kinetičnih podatkov. Večje število raziskav je že pokazalo, da je nastanek omenjenih struktur kinetično voden proces, vendar pa so poskusi opisa asociacije dveh enojnih verig v bimolekularne kvadrupleksne strukture privedli do uporabe negativnih aktivacijskih energij. Kot prvim nam je uspelo izdelati model, ki s samo pozitivnimi aktivacijskimi energijami za vse elementarne reakcije uspešno opiše zvijanje in razvijanje G-kvadrupleksov, ki nastanejo iz d(G4T4G4) in d(G4T4G3) verig ob prisotnosti Na ⁺ ionov.	
		ANG Existing evidences on polymorphism of G-quadruplexes have shown that the formation of a number of these structures is a kinetically controlled process. By combining structural, thermodynamic and kinetic information we have developed a novel kinetic model that successfully describes experimentally monitored folding/unfolding transitions of G-quadruplexes formed from d (G4T4G4) and d(G4T4G3) strands in the presence of Na ⁺ ions and gives positive activation energies for all elementary steps, including those describing association of two single strands into bimolecular quadruplex structures.	
	Objavljeno v		J. Am. Chem. Soc., 2008, vol. 130, no. 43, str. 14161-14169.
	Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek
COBISS.SI-ID		29937669	

6. Najpomembnejši družbeno-ekonomsko relevantni rezultati programske skupine⁵

Družbeno-ekonomsko relevantni rezultat			
1.	Naslov	SLO	Mednarodna konferenca o kemiji raztopin
		ANG	29. International Conference on Solution Chemistry
	»29. International Conference on Solution Chemistry«;		

	Opis	SLO	http://www.icsc2005.si/ je potekala od 20. do 25. 8. 2005 v Portorožu. Organizacija je bila v celoti v rokah programske skupine Fizikalna kemija. Predsednik prireditvenega odbora je bil prof. V. Vlachy, sekretarka pa prof. M. Bešter-Rogač. ICSC vodi mednarodni odbor, katerega član je tudi V. Vlachy, častna pokroviteljica pa je Mednarodna zveza za čisto in uporabno kemijo (I.U.P.A.C). Število udeležencev je bilo okoli 300, prišli so iz 37 držav sveta. Med predavatelji je bil tudi Nobelov nagrajenec profesor Jean-Marie Lehn.
		ANG	29. International Conference on Solution Chemistry http://www.icsc2005.si/) was organized by us from 20.-25.08.2005 in Portorož. Prof. V. Vlachy served as the chairman of the organizing committee and Prof. M. Bešter-Rogač as the secretary. Conferences are led by the international steering committee: V. Vlachy is one of the members. This high profile meeting was sponsored by the International Union of Pure and Applied Chemistry. There were about 300 participants from 37 countries among them the Nobel laureate Prof. Jean-Marie Lehn.
	Šifra	B.01 Organizator znanstvenega srečanja	
	Objavljeno v	BEŠTER-ROGAČ, Marija (ur.), VLACHY, Vojko (ur.). 29th International Conference on Solution Chemistry, August 21st - 25th, 2005, Portorož, Slovenia. Book of abstracts. Ljubljana: Faculty of Chemistry and Chemical Technology, 2005. 305 str. ISBN 961-6286-63-3.	
	Tipologija	2.31 Zbornik recenziranih znanstvenih prispevkov na mednarodni ali tuji konferenci	
	COBISS.SI-ID	221037824	
2.	Naslov	SLO	Vabljeni predavanja
		ANG	Invited lectures
	Opis	SLO	Vesnaver, G., »Calorimetry as a Tool for Studying Molecular Recognition and Stability in Bio-Systems«: 29. ICSC, 2005 Portorož. Vlachy, V. »Short-range interactions in polyelectrolyte solutions«: Regensburg, 2004. Vlachy, V., »Ion-specific effects in polyelectrolyte solutions«: ESF workshop, Compiègne, 2006. Vlachy, V. »Polyelectrolyte hydration: theory and experiment«: 30 ICSC, Perth, Australia, 2007. Vlachy, V. »Modeling Charged Macromolecules in Solution«: EPC, Portorož, 2007.
		ANG	Vesnaver, G., »Calorimetry as a Tool for Studying Molecular Recognition and Stability in Bio-Systems«: 29. ICSC, 2005 Portorož. Vlachy, V. »Short-range interactions in polyelectrolyte solutions«: Regensburg, 2004. Vlachy, V., »Ion-specific effects in polyelectrolyte solutions«: ESF workshop, Compiègne, 2006. Vlachy, V. »Polyelectrolyte hydration: theory and experiment«: 30 ICSC, Perth, Australia, 2007. Vlachy, V. »Modeling Charged Macromolecules in Solution«: EPC, Portorož, 2007.
	Šifra	B.04 Vabljeni predavanja	
	Objavljeno v	ni objave	
	Tipologija	1.12 Objavljeni povzetek znanstvenega prispevka na konferenci	
	COBISS.SI-ID	28862213	
3.	Naslov	SLO	Gostovanja na tujih univerzah
		ANG	Visiting professorships
	Opis	SLO	V šolskem letu 2006/07 je bil prof. V. Vlachy kot gostujoči profesor tri mesece na UC San Francisco (gostitelj prof. K.A. Dill), 6-mesecev na Univerzi v Regensburgu (Mercator stipendium; prof. H. Krienke) in en mesec na Université Pierre et Marie Curie, Pariz-6, Francija (prof. P. Turq). Prof. V. Vlachy je bil ponovno izvoljen v naziv »Adjunct Professor« na Department of Pharmaceutical Chemistry, University of California, San Francisco.
			In the school year 2006/07 Prof. V. Vlachy was a visiting professor for 3 months at UC San Francisco (host: Prof. K.A. Dill), for 6 months at University

		ANG	of Regensburg (Mercator stipendium; prof. H. Krienke) and for 1 month at Universite Pierre et Marie Curie, Pariz-6, France (Prof. P. Turq). Prof. V. Vlachy was also reelected for the title Adjunct Professor at the Department of Pharmaceutical Chemistry, University of California, San Francisco.
	Šifra	B.05	Gostujoči profesor na inštitutu/univerzi
	Objavljeno v	ni objave	
	Tipologija	3.14	Predavanje na tuji univerzi
	COBISS.SI-ID	29280261	
4.	Naslov	SLO	Uredništva
		ANG	Editorial job
	Opis	SLO	Uredništvo številke »Pure and Applied Chemistry«, vol. 78, 2006, št. 8. Ob posebni številki revije, ki je nastala ob »29th International Conference on Solution Chemistry«, sta bila za urednika povabljeni prof. V. Vlachy in prof. M. Bešter-Rogač. Prof. V. Vlachy in prof. M. Bešter-Rogač, sta bila vabljeni urednika tudi pri »Journal of molecular liquids«, vol. 131–132, str. 1–254, 2007. Prof. M. Bešter-Rogač, je sourednica Acta Chimica Slovenica (ACSi) in bila gostujoča urednica pri ACSi 2007, 54(3) in skupaj s prof. J. Škerjancem pri ACSi 2006, 53(3).
		ANG	Prof. V Vlachy and M. Bešter-Rogač served as guest editors for a special issue of Pure and Applied Chemistry, vol. 78, 2006, no. 8. Prof. V. Vlachy and Prof. M. Bešter-Rogač were guest editors for the Journal of molecular liquids, vol. 131–132, p. 1–254, 2007. Prof. M. Bešter-Rogač was associate editor of Acta Chimica Slovenica (ACSi), guest editor at ACSi 2007, 54(3), and together with Prof. J. Škerjanc guest editor at ACSi 2006, 53(3).
	Šifra	C.03	Vabljeni urednik revije (guest-associated editor)
	Objavljeno v	ni objavljeno	
	Tipologija	3.25	Druga izvedena dela
	COBISS.SI-ID	1298780	
5.	Naslov	SLO	Članstvo v Evropski akademiji znanosti in umetnosti
		ANG	Membership in EASA
	Opis	SLO	Profesor dr. V. Vlachy je bil izvoljen za rednega člana Evropske akademije znanosti in umetnosti (Academia Scientiarum et Artium Europaea) s sedežem v Salzburgu.
		ANG	Professor dr. V. Vlachy was elected active member of the European Academy of Science and Arts (Academia Scientiarum et Artium Europaea) Salzburg.
	Šifra	E.02	Mednarodne nagrade
	Objavljeno v	ni objavljeno	
	Tipologija	3.25	Druga izvedena dela
	COBISS.SI-ID	30369029	

7. Pomen raziskovalnih rezultatov programske skupine⁶

7.1. Pomen za razvoj znanosti⁷

SLO

Predlagane raziskave naj bi z uporabo najnovejših merskih tehnik in teoretičnih metod obogatile osnovna znanja na področju fizikalne kemije raztopin in disperzij. Vodne raztopine elektrolitov in (bio)polielektrolitov imajo pomembno mesto v znanosti in tehnologiji. Ioni, tako preprosti kot molekularni, sodelujejo v življenjsko pomembnih procesih v našem telesu. Voda igra pri tem osnovno vlogo, ki še zdaleč ni v celoti razumljena. O tako imenovanih 'hidrofobnih interakcijah', je napisanih mnogo knjig, a mnenja o tem, kako in zakaj nastanejo, si niso enotna. Raziskave stabilnosti proteinov v prisotnosti makromolekul in različnih soli, vezave ligandov na DNK in podobnosti molekul so pomembne v farmacevtski industriji in bioinženirstvu. V ekologiji in industriji pa je pomembno poznavanje lastnosti polielektrolitov, koloidov, površinsko aktivnih snovi ter interakcij med njimi in površinami. Eksperimentalne raziskave dopolnjujemo s teoretičnimi; namen našega dela je razumevanje lastnosti snovi na

molekularnem nivoju. Da so te raziskave zanimive za biomedicinske vede, priča dejstvo, da nam je bilo (skupaj s prof. K.A. Dillom, UC San Francisco) s strani National Institute of Health, USA ponovno odobreno štiriletno financiranje raziskav modelov hidratacije. Raziskovalci, ki sestavljajo to programsko skupino, so se uspešno uveljavili v svetu, o čemer pričajo objave v revijah kot so Proc. Natl. Acad. Sci. US, J. Am. Chem. Soc., Annu. Rev. Phys. Chem., Annu. Rev. Biophys. Biomol. Struct., Trends. Biochem.Sci., J. Phys. Chem. B, J. Chem. Phys., J. Stat. Phys., Langmuir, Biochemistry, Biophys. J, in J. Mol. Biology, vabljeni predavanja na znanstvenih srečanjih in predavanja na tujih univerzah. Skupina aktivno sodeluje z več kot desetimi uglednimi laboratoriji po svetu in ima s sodelavci teh laboratorijev skupne objave. Raziskovalci te skupine so recenzenti za revije kot so J. Phys. Chemistry B in C, Langmuir, J. Chem. Phys., J. Am. Chem. Soc, PCCP in druge.

ANG

The studies presented here shall with the help of modern experimental techniques and theoretical methods enrich our basic knowledge in the physical chemistry of solutions and dispersions. Aqueous solutions of electrolytes and (bio)polyelectrolytes play important role in science and technology. Ions, simple and complex, take place in vital processes in our organism. The role of water in these processes, though crucial, is not fully understood yet. There are books written about the 'hydrophobic interaction', but the opinions about its mechanism are not unique. Investigation of protein stability in presence of macromolecules and added salts, studies of ligand binding to DNA, or quantum-chemical similarity studies, are important for pharmaceutical industry and in bioengineering. On the other hand, understanding the properties of polyelectrolytes, surfactants and colloids and their interaction with surfaces is important for ecology and industry. Our experimental studies are closely connected with the theoretical ones: the goal is to understand the properties of matter on a molecular level. Our studies are also important for biomedical sciences; together with a group of Professor K.A. Dill (UC San Francisco) we have been awarded the National Institute of Health USA grant for 8 years altogether. Members of the group are not unknown to their colleagues abroad. Our papers were published in recognized journals as: Proc. Natl. Acad. Sci. US, J. Am. Chem. Soc., Annu. Rev. Phys. Chem., Annu. Rev. Biophys. Biomol. Struct., Trends. Biochem. Sci., J. Phys. Chem. B, J. Chem. Phys., J. Stat. Phys., Langmuir, Biochemistry, Biophys. J., and J. Mol. Biology. In addition we held lectures on international conferences and universities. We have joint papers with researchers from more than ten laboratories in the world. Members of the group serve as reviewers for J. Phys. Chem. B and C, Langmuir, J. Chem. Phys., JACS, PCCP, etc.

7.2. Pomen za razvoj Slovenije⁸

SLO

Raziskovalci, ki sestavljajo to skupino, so člani katedre za fizikalno kemijo Fakultete za kemijo in kemijsko tehnologijo Univerze v Ljubljani. Na katedri se predava 30 različnih predmetov s področja fizikalne kemije in sorodnih ved, ki jih letno obiskuje več kot 1000 študentov 6 različnih fakultet. Vsa predavanja imajo tudi laboratorijske vaje, saj je kemija eksperimentalna veda. Ob raziskavah se profesor s svojimi sodelavci uči in to znanje posreduje študentom. Brez dobrih učiteljev ni dobre šole, brez raziskav ni dobrih učiteljev. Že dlje časa sodelujemo z delovnimi organizacijami kot do Belinka - Perkemija, Lek, Krka in Cinkarna Celje. Pred kratkim je bila podpisana nova dolgoročna pogodba s tovarno Krka d.d., kjer se je pravkar zaposlil tudi naš zadnji doktorant. Že vse obdobje trajanja tega programa sodelujemo s tovarno Lek pri raziskavah stabilnosti nekaterih farmacevtskih sistemov. Skupina torej poglablja teoretična in eksperimentalna znanja s področja fizikalne kemije ter jih prenaša na študente ter tudi v prakso. Raziskovalci prispevamo k utrjevanju nacionalne identitete in kulturne dediščine tudi s povečevanjem prepoznavnosti Slovenije v svetu. Publikacije objavljene v uglednih znanstvenih revijah ter predavanja na konferencah in na tujih univerzah povečujejo ugled Slovenije v svetu. Leta 2005 je naša skupina pod pokroviteljstvom IUPAC-a organizirala konferenco o kemiji v raztopinah (29. ICSC). Konferenci je prisostvovalo okoli 300 raziskovalcev (med njimi tudi Nobelovec J-M. Lehn), mnogi so bili prvič pri nas. Vodja PS V. Vlachy je član programskega odbora te verige konferenc.

ANG

The researchers participating in this project are members of the Physical chemistry Chair at FKKT University of Ljubljana where we serve as educators. We are teaching 30 subjects from physical chemistry and related fields. There are around 1000 students from six different Departments taking these classes. All the classes include laboratory practice after all, Chemistry is an experimental science. Doing research the professors and their coworkers acquire new knowledge and communicate it to students. There is no good school without good teachers; we believe that good teachers can be formed through the process of self-education: the process is

called research. We have a long standing collaboration with pharmaceutical and chemical companies Belinka – Perkemija, Lek (Novartis group), Krka d.d, Cinkarna Celje. We have recently signed a long-term contract of collaboration with Krka d.d. Our former PhD student dr. B. Jerman, now employee of Krka d.d., will help in coordinating joint research. In summary, our group is engaged in research in the field of physical chemistry and in transferring this knowledge to students and to industrial practice. We contribute toward strengthening of the national identity and cultural heritage in several other ways. The publications published in distinguished journals and lectures at conferences and Universities abroad contribute toward »putting Slovenia on the map«. In year 2005 our group organized an important IUPAC-sponsored conference on chemistry in solutions (29. ICSC). We hosted around 300 guests (among them Nobel laureate Professor J-M. Lehn); some of them were for the first time in Slovenia. P.I. V. Vlasy is a member of the steering committee for the ICS conferences.

8. Zaključena mentorstva članov programske skupine pri vzgoji kadrov⁹

Vrsta izobraževanja	Število mentorstev	Od tega mladih raziskovalcev
- magisteriji	2	
- doktorati	10	6
- specializacije		
Skupaj:	12	6

9. Zaposlitev vzgojenih kadrov po usposabljanju

Organizacija zaposlitve	Število doktorjev	Število magistrov	Število specializantov
- univerze in javni raziskovalni zavodi	5	1	
- gospodarstvo	4	1	
- javna uprava			
- drugo	1		
Skupaj:	10	2	0

10. Opravljeno uredniško delo, delo na informacijskih bazah, zbirkah in korpusih v obdobju¹⁰

	Ime oz. naslov publikacije, podatkovne informacijske baze, korpusa, zbirke z virom (ID, spletna stran)	Število *
1.	Acta Chimica Slovenica, ISSN 1318-0207, področna urednica za fizikalno kemijo: M. Bešter-Rogač, 2004-.	108 /1/108
2.	Acta Chimica Slovenica, ISSN 1318-0207, gostujoča urednika: J. Škerjanc in M. Bešter-Rogač, 53 (3) 2006.	22/2/22
3.	Acta Chimica Slovenica, ISSN 1318-0207, gostujoča urednica: M. Bešter-Rogač, 54 (3) 2007.	33/1/33
4.	Pure and Applied Chemistry, ISSN 0033-4545, gostujoča urednika: V. Vlasy in M. Bešter-Rogač, Oxford, New York: Pergamon Press, 1960-, Vol. 78, No. 8, pp. 1477-1617, 2006.	5/2/5
5.	Journal of Molecular Liquids., gostujoča urednika: V. Vlasy in M. Bešter-Rogač, Amsterdam: Elsevier. ISSN 0167-7322. Vol. 131-132, 2007.	39/2/39
6.	Kongresni zbornik za "29th ICSC", ISBN 961-6286-63-3, urednika: V. Vlasy in M. Bešter-Rogač, 2005.	243/2/243

7.	Recenzija monografije za učitelje naravoslovnih predmetov z naslovom Med-predmetno povezovanje v naravoslovju (glavni urednik N. Bukovec, recenzenti: M. Bešter-Rogač, T. Verčkovnik, P. Ziherl), ISBN 978-961-6286-89-3, UL FKKT, Ljubljana 2007.	1/3/1
8.		
9.		
10.		

*Število urejenih prispevkov (člankov) /število sodelavcev na zbirki oz. bazi /povečanje obsega oz. število vnosov v zbirko oz. bazo v obdobju

11. Vključenost raziskovalcev iz podjetij in gostovanje raziskovalcev, podoktorandov ter študentov iz tujine, daljše od enega meseca

Sodelovanje v programski skupini	Število
- raziskovalci-razvijalci iz podjetij	
- uveljavljeni raziskovalci iz tujine	5
- podoktorandi iz tujine	1
- študenti, doktorandi iz tujine	1
Skupaj:	7

12. Vključevanje v raziskovalne programe Evropske unije in v druge mednarodne raziskovalne in razvojne programe ter drugo mednarodno sodelovanje v obravnavanem obdobju¹¹

1. S podpisom pogodbe R01 GM063592 (2005-2009) med "Regents of the University of California" in "Univerzo v Ljubljani" nam je bilo že drugič zapored zagotovljeno financiranje projekta "Modeling aqueous solvation in biology". Projekt izvajamo skupaj s skupino K.A. Dilla z omenjene univerze - nosilec na naši strani je prof. V. Vlasy. Stroške projekta v skupni višini nad 1 milijon USD v celoti krije Department of Health and Human Services (National Institute of Health), ZDA. Naš delež je okoli 138,000 USD.
2. Udeleženi smo v COST programu D31/0018/05 z naslovom: "Unfolding Structure and Energetics of Guanidinium Binding: The Anatomy of an Important Supramolecular Anchor Group by Concerted Theoretical and Experimental Approach"; Trajanje: od 21/03/2005 do 26/02/2009. (<http://costchemistry.epfl.ch/docs/D31/d31-18-05.htm>). Sodelujejo: 1. Carsten Schmuck, Universität Würzburg, Germany 2. Lars Baltzer, Uppsala University Sweden 3. Carlo Cavallotti, Politecnico di Milano Italy 4. Ernest Giralt, Barcelona Science Park Spain 5. Vladimír Král, Prague Technical University Czech Republic 6. Wolfgang Lindner, University of Vienna Austria 7. Franz P. Schmidtchen, Technical University of Munich Germany 8. Gorazd Vesnaver, Univerza v Ljubljani Slovenia.
3. "COST Action D43: Colloid and Interface Chemistry for Nanotechnology", 2006-2011
4. Sodelujemo pri projektu Partnerstvo fakultet in šol (financira Evropski socialni sklad in MŠŠ), št. pogodbe 3311-06-297007.
5. Sodelovali smo v projektu 5 okvirnega programa evropske komisije z naslovom "New carbohydrate-derived scaffolds for the generation of bioactive libraries" - HPRN-CT-2002-00173 (2004-2005).
6. Podoktorski projekt Z1-3029: Lastnosti in stabilnost raztopin nabitih nanodelcev (2001-2004)
7. Bilateralno sodelovanje med republiko Slovenijo in republiko Avstrijo:
 - SI-AT/04-05/04: Struktura in dinamika v koncentriranih sistemih (2004/05)
 - BI-AT/07-08-006: Nano-strukturirane kompleksne raztopine - Struktura in kinetika v novih materialih (2007/08)
8. Bilateralno sodelovanje med republiko Slovenijo in Madžarsko:
 - Obravnava strukture kompleksnih tekočin z metodama ozkokočnega rentgenskega sipanja in

reverzne simulacije Monte Carlo (2008/09)

9. Bilateralno sodelovanje med republiko Slovenijo in Združenimi državami Amerike:

- BI-US/05-06/006: Voda ob kompleksnih površinah (2005-06)
- BI-US/06-07/008: Vpliv dodatka linearnega polielektrolita na hitrost kemijske reakcije med ioni

10. Bilateralno sodelovanje med republiko Slovenijo in Portugalsko:

- BI-PT/04-06-012: Raziskave specifičnih vezav ionov in surfaktantov na aktivna mesta polielektrolitov (2004-06)
- BI-PT/08-09-007: Vpliv hidrofobnosti in togosti polimerne verige na interakcije med polielektroliti in surfaktanti (2008-09)

11. Bilateralno sodelovanje med republiko Slovenijo in Ukrajino:

- BI-UKR 07: Hidratacija preprostih in verigastih molekul (2005-06)
- BI-UKR 17: Hidratacija preprostih in verigastih molekul. 2. Rastopine polielektrolitov (2007)

13. Vključenost v projekte za uporabnike, ki potekajo izven financiranja ARRS¹²

1. Biofizikalno–kemijska karakterizacija rekombinantnih zdravil (za Lek d.o.o.; pogodba št. BIO 08/2006). V povezavi s farmacevtsko družbo Lek, d.d. trenutno izvajamo fizikalno-kemijsko karakterizacijo rekombinantnih zdravil. Gre za prenos obstoječih znanj, metod in postopkov v prakso, kar kaže na tehnološki pomen raziskav, ki jih izvaja naša raziskovalna skupina. Natančne naloge naše raziskovalne skupine v tem projektu in njihovo izvajanje so poslovna skrivnost.

2. Sodelavci Katedre za fizikalno kemijo so za Krko d.d. razvili metodo določanja potenciala nevodnih raztopin farmacevtskih učinkovin. Metodo in njeno uporabo so razložili na strokovnem predavanju za zaposlene v Krki jeseni 2006 in se od takrat praktično uporablja v tehnološkem procesu. Krka d.d. je z našim delom zadovoljna do te mere, da je pred kratkim enemu od svojih zaposlenih odobrila opravljanje doktorske naloge na naši katedri. V Krki d.d. se je zaposlil tudi naš bivši mladi raziskovalec dr. Boštjan Jerman, ki bo kot član naše programske skupine skrbel za uspešno sodelovanje med obema ustanovama.

3. Prof. C. Pohar je v okviru dolgoletnega sodelovanja pri raziskavah procesa industrijske kristalizacije v tovarni Belinka - Perkemija pripomogel k boljšemu razumevanju procesa kristalizacije, kar je vzpodbudilo izboljšave pri vodenju procesa in doseganju kvalitete produkta, ki v celoti ustreza zahtevam svetovnega trga (projekt CEGIPS; Del raziskav je objavljen v članku TESLIČ, Dušan, POHAR, Ciril. "Simulation of semibatch precipitation of sodium perborate tetrahydrate in an industrial crystallizer", Ind. Eng. Chem. Res. 2006, 45, str. 1064).

14. Dolgoročna sodelovanja z uporabniki, sodelovanje v povezavah gospodarskih in drugih organizacij (grozdi, mreže, platforme), sodelovanje članov programske skupine v pomembnih gospodarskih in državnih telesih (upravni odbori, svetovalna telesa, fundacije, itd.)

1. S Krko d.d. smo pred kratkim podpisali pogodbo o dolgoročnem sodelovanju in svetovanju (št. pogodbe I/8-106259)

2. Na osnovi uvodnih skupnih testnih raziskav je v pripravi pogodba o sodelovanju z Japonsko raziskovalno skupino z Univerze v Wasedi, in sicer na področju raziskav in razvoja umetnih prenašalcev kisika v obliki hemoglobin-veziklov v smislu nadomestka krvi.

15. Skrb za povezavo znanja s slovenskim prostorom in za slovensko znanstveno terminologijo (Cobiss tip 1.04, 1.06, 1.07, 1.08, 1.09, 1.17, 1.18, 2.02, 2.03, 2.04, 2.05, 2.06)¹³

Naslov	Moja prva kemija 2 : kemija za 9. razred devetletne osnovne šole
Opis	Osnovnošolski učbenik
Objavljeno v	Moja prva kemija 2 : kemija za 9. razred devetletne osnovne šole, Ljubljana, Modrijan, 2005
COBISS.SI-ID	219366400

16. Skrb za popularizacijo znanstvenega področja (Cobiss tip 1.05, 1.21, 1.22, 2.17, 2.19, 3.10, 3.11, 3.12)¹⁴

Naslov	Nevidni svet v barvah
Opis	Razstava je vizualizirala izsledke teoretičnih raziskav (kvantnomehanske simulacije, simulacije Monte Carlo in molekulske dinamike, teorije integralnih enačb, ozkokožno rentgensko sipanje, kinetične študije ...), s katerimi se zaposleni na Katedri za fizikalno kemijo dnevno srečujemo.
Objavljeno v	Katedra za fizikalno kemijo, Snežniška 5, Ljubljana, dne 10.1.2008
COBISS.SI-ID	29168133

17. Vpetost vsebine programa v dodiplomske in podiplomske študijske programe na univerzah in samostojnih visokošolskih organizacijah v letih 2004 – 2008

1.	Naslov predmeta	Fizikalna kemija
	Vrsta študijskega programa	Dodiplomski
	Naziv univerze/fakultete	Univerza v Ljubljani, FKKT, PF, BF, NTF, FF, FMF
2.	Naslov predmeta	Instrumentalne metode, Fizikalna kemija 2, Struktura atomov in molekul, Biofizikalna kemija, Merjenje, regulacija, avtomatizacija, Elektrokemija, Kemijska termodinamika, Makromolekulska kemija, Računalništvo in informatika, Fizikalna kemija in meritve, Merjenje in regulacija, Delovno okolje - prah, Metodika eksperimentov v fizikalni kemiji, Površinska in koloidna kemija, Praktikum iz fizikalne kemije
	Vrsta študijskega programa	Dodiplomski
	Naziv univerze/fakultete	Univerza v Ljubljani, FKKT
3.	Naslov predmeta	Procesna tehnika v živilstvu II, Statistična termodinamika
	Vrsta študijskega programa	Dodiplomski
	Naziv univerze/fakultete	Univerza v Ljubljani, BF
4.	Naslov predmeta	Fizikalna kemija II
	Vrsta študijskega programa	Dodiplomski
	Naziv univerze/fakultete	Univerza v Ljubljani, PF
5.	Naslov predmeta	Statistična termodinamika tekočin in raztopin, Raztopine elektrolitov, Sintetski polielektroliti in biopolimeri, Osnove molekulskega modeliranja, Termodinamika raztopin, Fizikalna kemija raztopin makromolekul in koloidov, Biološke makromolekule, Fizikalna kemija polimerov, Avtomatska regulacija procesov
	Vrsta študijskega programa	Podiplomski
	Naziv univerze/fakultete	

	fakultete	Univerza v Ljubljani, FKKT
6.	Naslov predmeta	Izbrana poglavja iz fizikalne kemije kamnin in rudnin, Polimeri
	Vrsta študijskega programa	Podiplomski
	Naziv univerze/fakultete	Univerza v Ljubljani, NTF
7.	Naslov predmeta	Koloidna kemija
	Vrsta študijskega programa	Podiplomski
	Naziv univerze/fakultete	Univerza v Ljubljani, BF

18. 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	☐	☐	☐	☒	
G.01.02.	Razvoj podiplomskega izobraževanja	☐	☐	☐	☒	
G.01.03.	Drugo: srednje šolstvo	☐	☐	☐	☒	
G.02	Gospodarski razvoj					
G.02.01	Razširitev ponudbe novih izdelkov/storitev na trgu	☐	☐	☐	☒	
G.02.02.	Širitev obstoječih trgov	☒	☐	☐	☐	
G.02.03.	Znižanje stroškov proizvodnje	☒	☐	☐	☐	
G.02.04.	Zmanjšanje porabe materialov in energije	☐	☐	☒	☐	
G.02.05.	Razširitev področja dejavnosti	☒	☐	☐	☐	
G.02.06.	Večja konkurenčna sposobnost	☐	☐	☒	☐	
G.02.07.	Večji delež izvoza	☒	☐	☐	☐	
G.02.08.	Povečanje dobička	☒	☐	☐	☐	
G.02.09.	Nova delovna mesta	☐	☒	☐	☐	
G.02.10.	Dvig izobrazbene strukture zaposlenih	☐	☐	☒	☐	
G.02.11.	Nov investicijski zagon	☒	☐	☐	☐	
G.02.12.	Drugo:	☐	☐	☐	☐	
G.03	Tehnološki razvoj					
G.03.01.	Tehnološka razširitev/posodobitev dejavnosti	☒	☐	☐	☐	
G.03.02.	Tehnološko prestrukturiranje dejavnosti	☒	☐	☐	☐	
G.03.03.	Uvajanje novih tehnologij	☐	☒	☐	☐	

G.03.04.	Drugo:		☐	☐	☐	☐	
G.04	Družbeni razvoj						
G.04.01.	Dvig kvalitete življenja		☐	☒	☐	☐	
G.04.02.	Izboljšanje vodenja in upravljanja		☒	☐	☐	☐	
G.04.03.	Izboljšanje delovanja administracije in javne uprave		☒	☐	☐	☐	
G.04.04.	Razvoj socialnih dejavnosti		☒	☐	☐	☐	
G.04.05.	Razvoj civilne družbe		☐	☒	☐	☐	
G.04.06.	Drugo:		☐	☐	☐	☐	
G.05.	Ohranjanje in razvoj nacionalne naravne in kulturne dediščine in identitete		☐	☒	☐	☐	
G.06.	Varovanje okolja in trajnostni razvoj		☐	☒	☐	☐	
G.07	Razvoj družbene infrastrukture						
G.07.01.	Informacijsko-komunikacijska infrastruktura		☒	☐	☐	☐	
G.07.02.	Prometna infrastruktura		☒	☐	☐	☐	
G.07.03.	Energetska infrastruktura		☒	☐	☐	☐	
G.07.04.	Drugo:		☐	☐	☐	☐	
G.08.	Varovanje zdravja in razvoj zdravstvenega varstva		☐	☒	☐	☐	
G.09.	Drugo:		☒	☐	☐	☐	

Komentar¹⁵

--

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 5., 6. in 7. 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:

vodja raziskovalnega programa		zastopniki oz. pooblaščen osebe raziskovalnih organizacij in/ali koncesionarjev
Vojeslav Vlacy	in/ali	Univerza v Ljubljani, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo

Kraj in datum:

Ljubljana

14.4.2009

Oznaka poročila: ARRS_ZV_RPROG_ZP_2008/619

¹ Napišite kratko vsebinsko poročilo, kjer boste predstavili raziskovalno hipotezo in opis raziskovanja. Navedite ključne ugotovitve, znanstvena spoznanja ter rezultate in učinke raziskovalnega programa. Največ 21.000 znakov vključno s presledki (približno tri in pol strani, velikosti pisave 11). [Nazaj](#)

² Največ 3000 znakov vključno s presledki (približno pol strani, velikosti pisave 11). [Nazaj](#)

³ Samo v primeru bistvenih odstopanj in sprememb od predvidenega programa raziskovalnega programa, kot je bil zapisan v predlogu raziskovalnega programa. Največ 3.000 znakov vključno s presledki (približno pol strani, velikosti pisave 11). [Nazaj](#)

⁴ Navedite največ pet najpomembnejših znanstvenih rezultatov programske skupine, ki so nastali v času trajanja programa v okviru raziskovalnega programa, 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](#)

⁵ Navedite največ pet najpomembnejših družbeno-ekonomsko relevantnih rezultatov programske skupine, ki so nastali v času trajanja programa v okviru raziskovalnega programa, 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, 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](#)

⁶ Pomen raziskovalnih rezultatov za razvoj znanosti in za razvoj Slovenije bo objavljen na spletni strani: <http://sicris.izum.si> [Nazaj](#)

⁷ Največ 4.000 znakov vključno s presledki [Nazaj](#)

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

⁹ Za raziskovalce, ki niso habilitirani, so pa bili mentorji mladim raziskovalcem, se vpiše ustrezen podatek samo v stolpec MR [Nazaj](#)

¹⁰ Vpisuje se uredništvo revije, monografije ali zbornika v skladu s Pravilnikom o kazalcih in merilih znanstvene in strokovne uspešnosti (Uradni list RS, št. 39/2006, 106/2006 in 39/2007), kar sodi tako kot mentorstvo pod sekundarno avtorstvo, in delo (na zlasti nacionalno pomembnim korpusu ali zbirki) v skladu z 3. in 9. členom istega pravilnika. Največ 1000 znakov (ime) oziroma 150 znakov (število) vključno s presledki. [Nazaj](#)

Zaključno poročilo o rezultatih raziskovalnega programa v obdobju 2004-2008

¹¹ Navedite oziroma naštejite konkretne projekte. Največ 12.000 znakov vključno s presledki. [Nazaj](#)

¹² Navedite konkretne projekte, kot na primer: industrijski projekti, projekti za druge naročnike, državno upravo, občine ipd. in ne sodijo v okvir financiranja pogodb ARRS. Največ 9.000 znakov vključno s presledki. [Nazaj](#)

¹³ Navedite objavo oziroma prevod (soobjavo) članov programske skupine strokovnega prispevka v slovenskem jeziku, ki se nanaša na povezavo znanja s slovenskim prostorom in za slovensko znanstveno terminologijo (Cobiss tip 1.04, 1.06, 1.07, 1.08, 1.09, 1.17, 1.18, 2.02, 2.03, 2.04, 2.05, 2.06). Napišite naslov (največ 150 znakov vključno s presledki), kratek opis (največ 600 znakov vključno s presledki), navedite, kje je objavljen/a (največ 500 znakov vključno s presledki) ter napišite ustrezno COBISS.SI-ID številko bibliografske enote. [Nazaj](#)

¹⁴ Navedite objavo oziroma prevod (soobjavo) članov programske skupine, povezano s popularizacijo znanosti (Cobiss tip 1.05, 1.21, 1.22, 2.17, 2.19, 3.10, 3.11, 3.12). Napišite naslov (največ 150 znakov vključno s presledki), kratek opis (največ 600 znakov vključno s presledki), navedite, kje je objavljen/a (največ 500 znakov vključno s presledki), ter napišite ustrezno COBISS.SI-ID številko bibliografske enote. [Nazaj](#)

¹⁵ Komentar se nanaša na 18. točko in ni obvezen. Največ 3.000 znakov vključno s presledki. [Nazaj](#)

Obrazec: ARRS-ZV-RPROG-ZP/2008 v1.00a