

Oznaka poročila: ARRS-RPROJ-ZP-2011-1/31

## ZAKLJUČNO POROČILO O REZULTATIH RAZISKOVALNEGA PROJEKTA

### A. PODATKI O RAZISKOVALNEM PROJEKTU

#### 1. Osnovni podatki o raziskovalnem projektu

<b>Šifra projekta</b>	J1-0249
<b>Naslov projekta</b>	Razvoj računalniških algoritmov za makromolekularne simulacije
<b>Vodja projekta</b>	6734 Dušanka Janežič
<b>Tip projekta</b>	J Temeljni projekt
<b>Obseg raziskovalnih ur</b>	4.170
<b>Cenovni razred</b>	D
<b>Trajanje projekta</b>	02.2008 - 01.2011
<b>Nosilna raziskovalna organizacija</b>	104 Kemijski inštitut
<b>Raziskovalne organizacije - soizvajalke</b>	
<b>Družbeno-ekonomski cilj</b>	13. Splošni napredek znanja - RiR financiran iz drugih virov (ne iz splošnih univerzitetnih fondov - SUF)

#### 1.1. Družbeno-ekonomski cilj<sup>1</sup>

<b>Šifra</b>	13.01
<b>Naziv</b>	Naravoslovne vede - RiR financiran iz drugih virov (ne iz SUF)

#### 2. Sofinancerji<sup>2</sup>

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

### B. REZULTATI IN DOSEŽKI RAZISKOVALNEGA PROJEKTA

#### 3. Poročilo o realizaciji programa raziskovalnega projekta<sup>3</sup>

Cilj predlaganega raziskovalnega projekta je bil povečanje natančnosti in učinkovitosti obstoječih algoritmov za računalniške simulacije makromolekularnih sistemov. Predvsem smo razvili učinkovite rešitve za klasične in kvantne enačbe gibanja s pomočjo novo razvitih simplektičnih algoritmov, ki temeljijo na analitični obravnavi visokofrekvenčnih gibanj; izboljšali obravnavo topila pri simulaciji molekulske dinamike z razvojem metod, kjer le hidratacijsko plast topila predstavimo eksplicitno, preostali del topila pa implicitno; in razvili smo nove algoritme in spletni strežnik za napovedovanje proteinskih vezavnih mest.

Predlagane metodološke izboljšave omogočajo povečanje zmogljivosti obstoječih algoritmov tako glede velikostne kot časovne skale in s tem prispevajo k boljšemu vpogledu v odnos med strukturo in funkcijo obravnavanega sistema. Uporabnost novo razvitih metod in pristopov smo pokazali na nekaterih biološko zanimivih primerih, zlasti na napovedovanje vezavnih mest na proteinih s pomočjo strežnika ProBiS.

#### 4. Ocena stopnje realizacije zastavljenih raziskovalnih ciljev<sup>4</sup>

Predvidena stopnja realizacije zastavljenih raziskovalnih ciljev projekta je bila v celoti dosežena.

#### 5. Utemeljitev morebitnih sprememb programa raziskovalnega projekta oziroma sprememb, povečanja ali zmanjšanja sestave projektne skupine<sup>5</sup>

Ni bilo nobenih sprememb programa raziskovalnega projekta ne sprememb raziskovalne skupine.

#### 6. Najpomembnejši znanstveni rezultati projektne skupine<sup>6</sup>

		Znanstveni rezultat	
1.	Naslov	SLO	Charming spletna stran
		ANG	Charming web server
	Opis	SLO	V sodelovanju z National Institutes of Health, Bethesda, MD, ZDA, smo razvili <a href="http://charming.org">http://charming.org</a> , spletno stran, ki omogoča enostavnejšo pripravo vhodnih datotek za program CHARMM (Chemistry at Harvard Macromolecular Mechaniscs). Posamezni programi v tem vmesniku so bili razviti na Kemijskem inštituitu.
		ANG	In collaboration with the National Institutes of Health, Bethesda, MD, USA we have developed <a href="http://charming.org">http://charming.org</a> , a web interface to prepare input files for the CHARMM (Chemistry at Harvard Macromolecular Mechaniscs) program. Some of the programs which run the web site were developed at the National Institute of Chemistry.
	Objavljeno v	MILLER, Benjamin T., SINGH, Rishi P., KLAUDA, Jeffrey B., HODOŠČEK, Milan, BROOKS, Bernard R., WOODCOCK, H. Lee. CHARMMinG : a new, flexible web portal for CHARMM. J. chem. inf. mod., 2008, issue 9, vol. 4, str. 1920-1929.	
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek	
COBISS.SI-ID	3983386		
2.	Naslov	SLO	Razvoj potencialnega polja za fleksibilno AIPO4-34 molekularno mrežo
		ANG	Development of a force field of the triclinic framework of AIPO4-34
	Opis	SLO	Razvili smo novo potencialno polje za simulacijo molekulske dinamike AIPO4-34 fleksibilne molekularne mreže. Tako razvito polje omogoča natančne in stabilne izračune simulacije molekulske dinamike fleksibilnih in električno nabitih molekularnih sit alumofosfatov.

		ANG	A force field of the triclinic framework of AlPO <sub>4</sub> -34, important in methanol-hydrocarbon conversion reactions, was developed using an empirical potential function. The new force field permits detailed molecular dynamics simulations of flexible, charged aluminophosphate molecular sieves.
	Objavljeno v		PRAPROTNIK, Matej, HOČEVAR, Stanko, HODOŠČEK, Milan, PENCA, Matej, JANEŽIČ, Dušanka. New all-atom force field for molecular dynamics simulation of an AlPO <sub>4</sub> -34 molecular sieve. J. comput. chem., 2008, vol. 29, no. 1, str. 122-129.
	Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek
	COBISS.SI-ID		3707418
3.	Naslov	SLO	Vzporedna simulacija molekulske dinamike na hamiltonskih kubičnih grafih
		ANG	Parallel MD on Hamiltonian Cubic Graphs
	Opis	SLO	Predstavili smo vzporedne računalniške mreže osnovane na hamiltonskih kubičnih grafih za hitro izvajanje simulacije molekulske dinamike. Pokazali smo, da so hamiltonski kubični grafi majhnih premerov odlični kandidati za nove računalniške topologije za izvajanje vzporedne simulacije molekulske dinamike.
		ANG	A class of interconnection networks for efficient parallel MD simulations based on Hamiltonian cubic symmetric graphs is presented. Analyzing these communication routines shows that Hamiltonian cubic symmetric graphs of small diameter are good candidates for a topology that gives rise to an interconnection network with excellent properties, allowing faster communication and thus speeding up parallel MD simulation.
	Objavljeno v		KUTNAR, Klavdija, BORŠNIK, Urban, MARUŠIČ, Dragan, JANEŽIČ, Dušanka. Interconnection networks for parallel molecular dynamics simulation based on hamiltonian cubic symmetric topology. J. math. chem., 2009, vol. 45, no. 2, str. 372-385.
	Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek
COBISS.SI-ID		3964698	
4.	Naslov	SLO	ProBiS algoritem za napovedovanje proteinskih vezavnih mest
		ANG	ProBiS algorithm for protein binding sites prediction
	Opis	SLO	Poznavanje vezavnih mest na proteinih je predpogoj za razvoj novih inhibitorjev proteinskih interakcij. Kot prvi smo prvi pokazali, da so proteinska vezavna mesta strukturno ohranjena. Razvili smo nov algoritem za napovedovanje vezavnih mest na proteinih, ki išče ohranjenost površinskih struktur in fizikalno-kemijskih lastnosti v strukturno sorodnih proteinih. Našli smo dobro ujemanje napovedanih vezavnih mest z dejanskimi. Naš algoritem za iskanje strukturne ohranjenosti v množici sorodnih proteinov je uporaben za napovedovanje vezavnih mest na proteinih.
		ANG	Prediction of protein binding sites is important for the development of new drugs targeting protein-protein interactions. We show unambiguously for the first time that protein-protein binding sites are structurally conserved. A new algorithm to predict protein-protein binding sites using conservation of both protein surface structure and physical-chemical properties in structurally similar proteins was developed. The predicted binding sites and the actual binding sites are in good agreement. Our algorithm is a useful tool for the prediction of protein binding sites.
	Objavljeno v		KONC, Janez, JANEŽIČ, Dušanka. ProBiS algorithm for detection of structurally similar protein binding sites by local structural alignment. Bioinformatics (Oxf., Print), 2010, vol. 26, no. 9, str. 1160-1168. JCR IF: 4.926, SE (2/29)
	Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek
COBISS.SI-ID		4395802	
5.	Naslov	SLO	ProBiS spletni strežnik za napovedovanje proteinskih vezavnih mest
		ANG	ProBiS web server for protein binding sites prediction
	Opis	SLO	Razvili smo tudi spletni strežnik, dostopen na <a href="http://probis.cmm.ki.si">http://probis.cmm.ki.si</a> , na voljo širokemu krogu uporabnikov, v katerem so združene metode, opisane v zgoraj navedeni publikaciji.

	ANG	We have also developed a web-tool, available at <a href="http://probis.cmm.ki.si">http://probis.cmm.ki.si</a> for protein binding sites detection, which implements methods described in publication above.
Objavljeno v		KONC, Janez, JANEŽIČ, Dušanka. ProBiS : a web server for detection of structurally similar protein binding sites. Nucleic Acids Res., 2010, vol. 38, iss. 2, str. W436-W440. JCR IF: 7.479, SE (27/283)
Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek
COBISS.SI-ID		4404506

## 7. Najpomembnejši družbeno-ekonomsko relevantni rezultati projektne skupine<sup>6</sup>

Družbeno-ekonomsko relevantni rezultat		
1.	Naslov	<p><i>SLO</i> Urednik, Journal of Chemical Information and Modeling, An American Chemical Society Publication, JRC IF (2008): 3.643, SE(2/94)</p> <p><i>ANG</i> Associate Editor, Journal of Chemical Information and Modeling, An American Chemical Society Publication, JRC IF (2008): 3.643, SE(2/94)</p>
	Opis	<p><i>SLO</i> Prof. dr. Dušanka Janežič je od leta 2001 eden od urednikov mednarodne revije Journal of Chemical Information and Modeling (prej Journal of Chemical Information and Computer Sciences), An American Chemical Society Publication. <a href="http://pubs.acs.org/journals/jcisid8/editors.html">http://pubs.acs.org/journals/jcisid8/editors.html</a></p> <p><i>ANG</i> Since 2001 Prof. Dr. Dušanka Janežič is one of the Editors of the Journal of Chemical Information and Modeling (formerly Journal of Chemical Information and Computer Sciences), An American Chemical Society Publication. <a href="http://pubs.acs.org/journals/jcisid8/editors.html">http://pubs.acs.org/journals/jcisid8/editors.html</a></p>
	Šifra	C.01 Uredništvo tujega/mednarodnega zbornika/knjige
	Objavljeno v	Journal of Chemical Information and Modeling <a href="http://pubs.acs.org/page/jcisid8/editors.html">http://pubs.acs.org/page/jcisid8/editors.html</a> JRC IF (2008): 3.643, SE(2/94)
	Tipologija	4.00 Sekundarno avtorstvo
	COBISS.SI-ID	26533125
2.	Naslov	<p><i>SLO</i> Proteinsko sidranje</p> <p><i>ANG</i> Protein docking</p>
	Opis	<p><i>SLO</i> Razvili smo nov algoritem za iskanje tistih strukturnih podobnosti na protenskih površinah, ki so prisotne pri med proteinskih interakcijah. Tako razviti algoritem smo vgradili v AutoDoc program in ga uporabili za proteinsko sidranje.</p> <p><i>ANG</i> We have developed an algorithm for structural similarity search in multiple related proteins to find conserved binding regions on proteins involved in protein-protein interactions. We have used this algorithm to tune the AutoDock docking algorithm to predict the native protein complex structure from unbound protein structures.</p>
	Šifra	B.03 Referat na mednarodni znanstveni konferenci
	Objavljeno v	JANEŽIČ, Dušanka, KONC, Janez, PENCA, Matej, POLJANEC, Ksenija. Protein binding sites prediction and docking. V: MAROULIS, George (ur.), SIMOS, Theodore (ur.). Computational methods in science and engineering : advances in computational science : AIP conference proceedings, Atomic, molecular, and optical physics, vol. 1148. Melville [NY, USA]: American Institute of Physics, 2009, str. 429-432.
	Tipologija	1.08 Objavljeni znanstveni prispevek na konferenci
	COBISS.SI-ID	4213274
3.	Naslov	<p><i>SLO</i> Vabljen predavanje na ACS konferenci, Boston, MA, 2010</p> <p><i>ANG</i> Invited lecture at the ACS Meeting, Boston, MA, 2010.</p>
	Opis	<p><i>SLO</i> Na tem predavanju so bile predstavljene naše novo razvite metode za molekularno modeliranje bioloških makromolekul.</p> <p><i>ANG</i> This presentation focused on our recent efforts to develop new methods for molecular modeling of biological macromolecules.</p>

	Šifra	B.03	Referat na mednarodni znanstveni konferenci
	Objavljeno v	JANEŽIČ, Dušanka. Computer algorithm development for modeling of biological macromolecules. V: 240th American Chemical Society National Meeting and Exposition, August 22-26, 2010, Boston, MA. Chemistry for preventing and combating disease : abstract 2 view. Boston: ASC, 2010, 1 str.	
	Tipologija	1.12	Objavljeni povzetek znanstvenega prispevka na konferenci
	COBISS.SI-ID	4624922	
4.	Naslov	SLO	Vabljen predavanje na NIH/National Library
		ANG	Invited talk at NIH/National Library
	Opis	SLO	Predstavljen je bil ProBiS algoritem in ProBiS strežnik, ki je namenjen napovedovanju proteinskih vezavnih mest, ki jih najdemo prek iskanja lokalno strukturno podobnih proteinov v PDB (Protein Data Bank) bazi.
		ANG	Presented were the ProBiS algorithm and the ProBiS web server which aims to predict the protein binding sites that are found via the local protein structure search in the PDB data bank (Protein Data Bank).
	Šifra	B.04	Vabljen predavanje
	Objavljeno v	JANEŽIČ, Dušanka. Computer modeling of biological macromolecules : lecture at CBB seminar, Library of National Center for Biotechnology Information, December 22, 2010, Bethesda (USA). Bethesda, 2010.	
	Tipologija	3.14	Predavanje na tuji univerzi
	COBISS.SI-ID	4637722	
5.	Naslov	SLO	Pisanje in objavlanje znanstvenih publikacij
		ANG	Scientific writing and publishing
	Opis	SLO	Predstavljene so bile procedure in navodila za uspešno objavlanje v najboljših znanstvenih revijah.
		ANG	Tips for scientific writing and publishing in prestigious scientific journals were presented.
	Šifra	B.03	Referat na mednarodni znanstveni konferenci
	Objavljeno v	JANEŽIČ, Dušanka. Tips for publication in high impact journal for Drug Design and Molecular Modeling : invited lecture at 3rd National Seminar and Workshop on Computer Aided Drug Design, 6th-8th December 2010, Penang, Malaysia. Penang, 2010.	
	Tipologija	3.16	Vabljen predavanje na konferenci brez natisa
	COBISS.SI-ID	4623642	

## 8. Drugi pomembni rezultati projektne skupine<sup>8</sup>

Na Kemijskem inštitutu je bil ustanovljen novi Laboratorij za molekularno modeliranje – L17 s sklepom Upravnega odbora Kemijskega inštituta z dne 03.12.2008 in je pričel s samostojnim delovanjem dne 01.01.2009. Za vodjo je bila imenovana prof. dr. Dušanka Janežič za dobo štirih let.

Spletna naslova L17:

1. <http://www.ki.si/raziskovalne-enote/l17-laboratorij-za-molekularno-modeliranje/>
2. [www.sicmm.org](http://www.sicmm.org)

V letu 2010 je v okviru ARRS programa uveljavljenih raziskovalcev pri prof. dr. Dušanki Janežič tri mesece deloval Dr. Bernard R. Brooks iz NIH/NHLBI, Bethesda, MD, ZDA.

Izgradili smo več novih računalniških sistemov VRANA (<http://www.sicmm.org/vrana>) s superračunalniško zmogljivostjo. Najnovejši, VRANA-13 je sestavljen je iz 14 dual AMD-6128 enot in 12 quad AMD-6128 enot.

Razvili smo računalniški sistem KAVKA, na katerem je nameščen spletni strežnik ProBiS za napovedovanje vezavnih mest na proteinih. Strežnik je dostopen na naslovu <http://probis.cmm.ki.si>

Prof. dr. Dušanka Janežič je bila leta 2010 izbrana med 50 najbolj plodnih avtorjev v 50-letih obstoja izjemne mednarodne znanstvene revije J. Chem. Inf. Model., ki jo izdaja založba American Chemical Society (ACS).

Posebej izpostavljamo citiranost članka: BROOKS, B.R., BROOKS, C.L., MACKERELL, A.D., NILSSON, L., PETRELLA, R., ROUX, B., WON, Y., ARCHONTIS, G., BARTELS, C., BORESCH, S., CAFLISCH, A., CAVES, L., CUI, Q., DINNER, A., FEIG, M., FISCHER, S., GAO, J., HODOŠČEK, Milan, IM, W., KUCZERA, K., LAZARIDIS, T., MA, J., OVCHINNIKOV, V., PACI, E., PASTOR, R.W., POST, C.B., PU, J., SCHAEFER, M., TIDOR, B., VENABLE, R.M., WOODCOCK, H.L., WU, X., YANG, W., YORK, D.M., KARPLUS, M. J. Comput. Chem., 2009, 30, 1545-1614, ki je bil do sedaj citiran že 265-krat.

## 9. Pomen raziskovalnih rezultatov projektne skupine<sup>9</sup>

### 9.1. Pomen za razvoj znanosti<sup>10</sup>

SLO

Razvoj na področju algoritmov za simulacije makromolekularnih sistemov, na osnovi katerih deluje tudi metoda molekulske dinamike, omogoča večjo natančnost računanja in s tem bolje izrabljen računalniški čas pri obravnavanju biološko zanimivih molekul, kakor tudi daljše simulacije kompleksnih sistemov. Novo izpeljane metode so posebej obetavne, ker dopuščajo tudi vključitev hidratacijskih efektov, kar predstavlja bistveno izboljšavo za simulacijo molekulske dinamike. S praktičnega stališča pa je zaradi večje napovedne sposobnosti bolj ekonomičnih metod za simulacijo molekulske dinamike pridobilo tudi področje proteinskega inženiringa.

Novo razvite algoritme za simulacije makromolekulskih sistemov, molekulske dinamike in drugih, je možno kot dodatni modul vgraditi v računalniške programe, ki se široko uporabljajo za molekularno modeliranje biološko pomembnih molekul. Povečanje napovednih sposobnosti metod za simulacijo molekulske dinamike proteinov je zelo pomembno za metode genetskega inženiringa, kajti s tem smo bliže razumevanju povezave med tridimenzionalno strukturo in biološko funkcijo proteinov. Glede na obete, ki jih daje Human Genome Project se bo zelo povečala potreba po napovedovanju struktur višjega reda iz primarnih struktur.

To delo je pomembno tudi za razvoj sodobnih metod za računalniške simulacije, s pomočjo katerih bo mogoče simulirati večje molekulske sisteme bolj ekonomično in v krajšem računskem času. Rezultat tega projekta - nove metode - smo nekatere že, druge pa še bomo, vgradili v CHARMM (Chemistry at HARvard for Macromolecular Mechanics) pogosto uporabljen računalniški program za simulacije makromolekularnih sistemov.

ANG

New developments in molecular dynamics integration methods can find wide applications in computer simulations of the structure and dynamics of biological macromolecules in contributing to higher precision and economy of computation. The new methods use less computer time and therefore extend the applicability of simulation strategies to larger systems and enable higher precision calculations. A particularly promising consequence of the enhanced possibilities offered by the new methods is the inclusion of solvent effects. This requires a major computational effort in present schemes, thus strongly limiting the number of solvent molecules that can be included in the simulation. The new methods should therefore highly improve on this important aspect of molecular simulations. From the practical point of view, protein engineering should benefit from the predicting capacity of the molecular dynamics simulation methods that would become more economical. Since protein engineering is a promising area of development in at least two institutes in Slovenia, the benefit of this research is obvious.

The development of molecular dynamics algorithms as presented can be included as a software module in computer programs commonly used for molecular modeling of biological systems. The ability to improve the predicting power of methods used in the simulation of proteins is of paramount importance for protein engineering and is sealing the relation between the higher order structure of proteins and their biological function.

The research carried out following this proposal is of great importance to the development of modern simulation techniques that hold the promise to greatly increase our ability to simulate large macromolecular systems with a reasonable amount of computational effort.

It is expected that the product of this research effort will be added to the CHARMM (Chemistry

at HARvard for Macromolecular Mechanics) program and distributed for use by others throughout the world.

## 9.2. Pomen za razvoj Slovenije<sup>11</sup>

SLO

Cilj projekta je bil razvoj, izboljšava in analiza numeričnih metod za računalniške simulacije makromolekulskih sistemov, še posebej metodo simulacije molekulske dinamike in uporaba le teh algoritmov za obravnavo biološko zanimivih makromolekul. Pomemben del projekta predstavlja implementacija novo razvitih metod na vzporednih računalnikih. Pomemben del projekta je tudi to, da nam je s tem omogočeno sodelovanje z vodilnimi laboratoriji v svetu na tem področju.

Rezultate raziskav smo objavili v najboljših mednarodnih znanstvenih revijah in jih predstavili na mednarodnih in domačih znanstvenih konferencah.

Pri raziskavah, ki jih izvajamo v okviru našega raziskovalnega dela v Centru za molekularno modeliranje na Kemijskem inštitutu, v sodelovanju s firmo Lek, d.d., Raziskave učinkovin delamo na projektih raziskav novih učinkovin na kardiovaskularnem in antiinfektivnem terapevtskem področju. Sodelujemo tudi z IJS, MF, FMF, BF, FF, FRI (vse UL), in FAMNIT, UP.

Sodelavci naše skupine smo vpeti v več industrijskih projektov, ki se v okviru Laboratorija za molekularno modeliranje in Centra za molekularno modeliranje na KI izvajajo v sodelovanju s firmo Lek, d.d. Delamo na področju molekularnega modeliranja na projektih raziskav novih učinkovin. Industrijski projekt za LEK, d.d., po pogodbi št. BIO-6/2010: Računalniško modeliranje biofarmaceutskih molekul s serverjem ProBiS. Vodja projekta je prof. dr. Dušanka Janežič.

ANG

The purpose of the project is to develop, improve, and apply the computational methods for molecular dynamics simulations in the study of the structure and dynamics of biological macromolecules, such as proteins. The project focuses on specific problems of molecular biology, on code development and application, and also on its parallel implementation. An important component of the project involves close collaboration with the leading laboratories in this research field.

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

In collaboration between the Center for Molecular Modeling from the National Institute of Chemistry and Lek, a new Sandoz company, Drug Discovery we apply computer simulations to novel chemical entities (NCE's) in the antiinfective and cardiovascular therapeutic areas.

We collaborate also with groups from the IJS, MF, FMF, BF, FF, FRI ( UL), and FAMNIT (UP).

In collaboration with Lek, a new Sandoz company, Drug Discovery the Laboratory for Molecular Modeling is involved in several industrial projects that use molecular modeling methods for research into new drug leads. Industrial project for LEK, d.d., contract number BIO-6/2010: Computer modeling of biopharmaceutical molecules bt web server ProBiS. PI: Prof. Dr. Dušanka Janežič.

## 10. Samo za aplikativne projekte!

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

Cilj	
<b>F.01</b>	<b>Pridobitev novih praktičnih znanj, informacij in veščin</b>
	Zastavljen cilj <input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat <input type="text"/>
	Uporaba rezultatov <input type="text"/>
<b>F.02</b>	<b>Pridobitev novih znanstvenih spoznanj</b>

	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.03</b>	<b>Večja usposobljenost raziskovalno-razvojnega osebja</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.04</b>	<b>Dvig tehnološke ravni</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.05</b>	<b>Sposobnost za začetek novega tehnološkega razvoja</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.06</b>	<b>Razvoj novega izdelka</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.07</b>	<b>Izboljšanje obstoječega izdelka</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.08</b>	<b>Razvoj in izdelava prototipa</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.09</b>	<b>Razvoj novega tehnološkega procesa oz. tehnologije</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.10</b>	<b>Izboljšanje obstoječega tehnološkega procesa oz. tehnologije</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.11</b>	<b>Razvoj nove storitve</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>



	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.12</b>	<b>Izboljšanje obstoječe storitve</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.13</b>	<b>Razvoj novih proizvodnih metod in instrumentov oz. proizvodnih procesov</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.14</b>	<b>Izboljšanje obstoječih proizvodnih metod in instrumentov oz. proizvodnih procesov</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.15</b>	<b>Razvoj novega informacijskega sistema/podatkovnih baz</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.16</b>	<b>Izboljšanje obstoječega informacijskega sistema/podatkovnih baz</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.17</b>	<b>Prenos obstoječih tehnologij, znanj, metod in postopkov v prakso</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.18</b>	<b>Posredovanje novih znanj neposrednim uporabnikom (seminarji, forumi, konference)</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.19</b>	<b>Znanje, ki vodi k ustanovitvi novega podjetja ("spin off")</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.20</b>	<b>Ustanovitev novega podjetja ("spin off")</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>

<b>F.21</b>	<b>Razvoj novih zdravstvenih/diagnostičnih metod/postopkov</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.22</b>	<b>Izboljšanje obstoječih zdravstvenih/diagnostičnih metod/postopkov</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.23</b>	<b>Razvoj novih sistemskih, normativnih, programskih in metodoloških rešitev</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.24</b>	<b>Izboljšanje obstoječih sistemskih, normativnih, programskih in metodoloških rešitev</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.25</b>	<b>Razvoj novih organizacijskih in upravljavskih rešitev</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.26</b>	<b>Izboljšanje obstoječih organizacijskih in upravljavskih rešitev</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.27</b>	<b>Prispevek k ohranjanju/varovanje naravne in kulturne dediščine</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.28</b>	<b>Priprava/organizacija razstave</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.29</b>	<b>Prispevek k razvoju nacionalne kulturne identitete</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.30</b>	<b>Strokovna ocena stanja</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE

	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.31</b>	<b>Razvoj standardov</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.32</b>	<b>Mednarodni patent</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.33</b>	<b>Patent v Sloveniji</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.34</b>	<b>Svetovalna dejavnost</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.35</b>	<b>Drugo</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>

**Komentar**

**11. Samo za aplikativne projekte!**

Označite potencialne vplive oziroma učinke vaših rezultatov na navedena področja

	Vpliv	Ni vpliva	Majhen vpliv	Srednji vpliv	Velik vpliv	
<b>G.01</b>	<b>Razvoj visoko-šolskega izobraževanja</b>					
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"/>	
<b>G.02</b>	<b>Gospodarski razvoj</b>					
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"/>	
	Zmanjšanje porabe materialov in					

G.02.04.	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="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
<b>G.03</b>	<b>Tehnološki razvoj</b>					
G.03.01.	Tehnološka razširitev/posodobitev dejavnosti	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.03.02.	Tehnološko prestrukturiranje dejavnosti	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.03.03.	Uvajanje novih tehnologij	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.03.04.	Drugo:	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
<b>G.04</b>	<b>Družbeni razvoj</b>					
G.04.01	Dvig kvalitete življenja	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.04.02.	Izboljšanje vodenja in upravljanja	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.04.03.	Izboljšanje delovanja administracije in javne uprave	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.04.04.	Razvoj socialnih dejavnosti	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.04.05.	Razvoj civilne družbe	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.04.06.	Drugo:	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
<b>G.05.</b>	<b>Ohranjanje in razvoj nacionalne naravne in kulturne dediščine in identitete</b>					
<b>G.06.</b>	<b>Varovanje okolja in trajnostni razvoj</b>					
<b>G.07</b>	<b>Razvoj družbene infrastrukture</b>					
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"/>	
<b>G.08.</b>	<b>Varovanje zdravja in razvoj zdravstvenega varstva</b>					
<b>G.09.</b>	<b>Drugo:</b>					

**Komentar**

--

**12. Pomen raziskovanja za sofinancerje, navedene v 2. točki [12](#)**

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

		5.	
	<b>Komentar</b>		
	<b>Ocena</b>		

### C. IZJAVE

Podpisani izjavljam/o, da:

- so vsi podatki, ki jih navajamo v poročilu, resnični in točni
- se strinjamo z obdelavo podatkov v skladu z zakonodajo o varstvu osebnih podatkov za potrebe ocenjevanja, za objavo 6., 7. in 8. točke na spletni strani <http://sicris.izum.si/> ter obdelavo teh podatkov za evidence ARRS
- so vsi podatki v obrazcu v elektronski obliki identični podatkom v obrazcu v pisni obliki
- so z vsebino zaključnega poročila seznanjeni in se strinjajo vsi soizvajalci projekta

#### Podpisi:

Dušanka Janežič	in	
podpis vodje raziskovalnega projekta		zastopnik oz. pooblaščen oseba RO

Kraj in datum:

Ljubljana

21.4.2011

#### Oznaka poročila: ARRS-RPROJ-ZP-2011-1/31

<sup>1</sup> Zaradi spremembe klasifikacije družbeno ekonomskih ciljev je potrebno v poročilu opredeliti družbeno ekonomski cilj po novi klasifikaciji. [Nazaj](#)

<sup>2</sup> Samo za aplikativne projekte. [Nazaj](#)

<sup>3</sup> Napišite kratko vsebinsko poročilo, kjer boste predstavili raziskovalno hipotezo in opis raziskovanja. Navedite ključne ugotovitve, znanstvena spoznanja ter rezultate in učinke raziskovalnega projekta. Največ 18.000 znakov vključno s presledki (približno tri strani, velikosti pisave 11). [Nazaj](#)

<sup>4</sup> Realizacija raziskovalne hipoteze. Največ 3.000 znakov vključno s presledki (približno pol strani, velikosti pisave 11). [Nazaj](#)

<sup>5</sup> 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 (obrazložitev). V primeru, da sprememb ni bilo, to navedite. Največ 6.000 znakov vključno s presledki (približno ena stran, velikosti pisave 11). [Nazaj](#)

<sup>6</sup> Navedite največ pet najpomembnejših znanstvenih rezultatov projektne skupine, ki so nastali v času trajanja projekta v okviru raziskovalnega projekta, ki je predmet poročanja. Za vsak rezultat navedite naslov v slovenskem in angleškem jeziku (največ 150 znakov vključno s presledki), rezultat opišite (največ 600 znakov vključno s presledki) v slovenskem in angleškem jeziku, navedite, kje je objavljen (največ 500 znakov vključno s presledki), izberite ustrezno šifro tipa objave po Tipologiji dokumentov/del za vodenje bibliografij v sistemu COBISS ter napišite ustrezno COBISS.SI-ID številko bibliografske enote. Navedeni rezultati bodo objavljeni na spletni strani <http://sicris.izum.si/>.

**PRIMER** (v slovenskem jeziku):

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

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

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

**Tipologija:** 1.01 - Izvirni znanstveni članek

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

<sup>7</sup> Navedite največ pet najpomembnejših družbeno-ekonomsko relevantnih rezultatov projektne skupine, ki so nastali v času trajanja projekta v okviru raziskovalnega projekta, ki je predmet poročanja. Za vsak rezultat navedite naslov (največ 150 znakov vključno s presledki), rezultat opišite (največ 600 znakov vključno s presledki), izberite ustrezen rezultat, ki je v Šifrantu raziskovalnih rezultatov in učinkov (Glej: <http://www.arrs.gov.si/sl/gradivo/sifranti/sif-razisk-rezult.asp>), navedite, kje je rezultat objavljen (največ 500 znakov vključno s presledki), izberite ustrezno šifro tipa objave po Tipologiji dokumentov/del za vodenje bibliografij v sistemu COBISS ter napišite ustrezno COBISS.SI-ID številko bibliografske enote.

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

<sup>8</sup> Navedite rezultate raziskovalnega projekta v primeru, da katerega od rezultatov ni mogoče navesti v točkah 6 in 7 (npr. ker se ga v sistemu COBISS ne vodi). Največ 2.000 znakov vključno s presledki. [Nazaj](#)

<sup>9</sup> 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](#)

<sup>10</sup> Največ 4.000 znakov vključno s presledki [Nazaj](#)

<sup>11</sup> Največ 4.000 znakov vključno s presledki [Nazaj](#)

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

Obrazec: ARRS-RPROJ-ZP/2011-1 v1.01

C6-CB-0C-DA-56-72-94-E8-DF-A4-B7-7D-22-5E-30-F8-F8-92-34-74