

Oznaka poročila: ARRS-RPROJ-ZP-2015/169



## ZAKLJUČNO POROČILO RAZISKOVALNEGA PROJEKTA

## A. PODATKI O RAZISKOVALNEM PROJEKTU

## 1. Osnovni podatki o raziskovalnem projektu

<b>Šifra projekta</b>	J1-4134
<b>Naslov projekta</b>	Računalniške simulacije večskalnih interakcij med tekočinskimi tokovi in mehko snovjo
<b>Vodja projekta</b>	19037 Matej Praprotnik
<b>Tip projekta</b>	J Temeljni projekt
<b>Obseg raziskovalnih ur</b>	7560
<b>Cenovni razred</b>	C
<b>Trajanje projekta</b>	07.2011 - 06.2014
<b>Nosilna raziskovalna organizacija</b>	104 Kemijski inštitut
<b>Raziskovalne organizacije - soizvajalke</b>	1554 Univerza v Ljubljani, Fakulteta za matematiko in fiziko
<b>Raziskovalno področje po šifrantu ARRS</b>	1 NARAVOSLOVJE 1.07 Računsko intenzivne metode in aplikacije
<b>Družbeno-ekonomski cilj</b>	13.01 Naravoslovne vede - RiR financiran iz drugih virov (ne iz SUF)
<b>Raziskovalno področje po šifrantu FOS</b>	1 Naravoslovne vede 1.07 Druge naravoslovne vede

## B. REZULTATI IN DOSEŽKI RAZISKOVALNEGA PROJEKTA

2. Povzetek raziskovalnega projekta<sup>1</sup>

SLO

Mnogo pomembnih lastnosti kondenzirane materije zahteva razumevanje, kako fizika na nanoskali vpliva na strukture in procese na mikroskali in nad njo. Tako imenovane večskalne tehnike se v zadnjem desetletju naglo razvijajo, da bi premostile to vrzel. "Večskalni problem" je skupen mnogo različnim disciplinam in razvili so obilico večskalnih modelov za obravnavo

različnih scenarijev bodisi v trdni ali mehki snovi. Glavni namen večskalnega modeliranja kompleksnih tekočin je študij vpliva velikih in počasnih krajevnih in časovnih skal tekočinskega toka na strukturo in dinamiko kompleksnih molekul (npr. polimerov, proteinov) oziroma kompleksnih interakcij (npr. interakcij med tekočino in trdno snovjo, fronte omočenja, formacija struktur, itd.). V tem kontekstu večskalno modeliranje temelji na razklopu domen: majhni del sistema [ $O(10\text{nm})$ ] rešujemo klasično s polnim atomističnim opisom in ga sklopimo z veliko večjo zunanjo domeno, ki jo opišemo z grobozrnatim (bodisi delčnim bodisi kontinuumskim) modelom. Centralna ideja takšnih dvoskalnih metod je, da velike in počasne procese rešimo z računsko nezahtevnim opisom, medtem ko ohranimo atomistično resolucijo le tam, kjer je to nujno potrebno. V tem projektu bomo sklopili molekularno domeno, kjer bomo uporabili simulacijo molekulske dinamike za reševanje enačb gibanja tekočine (molekularna tekočina kot npr. voda ali kompleksna tekočina npr. talina zvezdastih polimerov), s kontinuumsko domeno, ki jo bomo opisali z npr. Navier-Stokesovo enačbo. Študirali bomo vpliv (preko večskalnih interakcij) tekočinskega toka na molekularno domeno in obratno vpliv molekularne domene (preko robnih pogojev) na tekočinski tok.

ANG

Many relevant properties of condensed matter require understanding how the physics at the nanoscale builds up or intertwines with structures and processes on the microscale and beyond. The so called multiscale modeling techniques have been rapidly evolving during the last decade to bridge this gap. The "multiple-scale" problem is common to many different disciplines, and a variety of multiscale models are being designed to tackle different scenarios either in solids or soft matter. The main objective of multiscale modeling of complex fluids is to study the effect of large and slow flow scales on the structure and dynamics of complex molecules (e.g. polymers, proteins), or complex interactions (e.g. liquid-solid interfaces, wetting fronts, structure formation, etc.). In this context, multiscale modeling is usually based on domain decomposition: a small part of the system [ $O(10\text{nm})$ ] is solved using fully fledged (classical mechanics) atomistic detail and it is coupled to a (much larger) outer domain, described by a coarse-grained (either particle or continuum) model. The central idea of these "dualscale" methods is to solve large and slow processes using a computationally low demanding description, while retaining an atomistic detail only where necessary. In this project, we will couple the molecular domain, where we will employ molecular dynamics to describe the dynamics of a fluid (either a molecular liquid, e.g., water, or a complex fluid, e.g., a star polymers melt) with the continuum one, described using e.g. Navier-Stokes equation. We will study the influence (via the multiscale interactions) of the fluid flow on the molecular region and/or in turn the effect of the molecular region (through boundary conditions) on the fluid flow.

### 3. Poročilo o realizaciji predloženega programa dela na raziskovalnem projektu<sup>2</sup>

V zadnjem obdobju interes za večskalne simulacije molekularnih tekočin vztrajno raste. Ta razvoj je v veliki meri posledica intenzivnega razvoja področja nanotehnologije, kjer so nano-naprave tipično del večjega sistema (eksperimenti se ponavadi izvajajo v vodnem okolju). Za boljše razumevanje in izboljšave teh naprav je zato študij dinamike tekočin na nanoskali, kjer se lahko lastnosti tekočinskih tokov znatno razlikujejo od standardnega kontinuumskega opisa, odločilnega pomena. Simulacija molekulske dinamike je učinkovita metoda za študij tekočin na nanoskali. Vendar ponavadi ne omogoča premostitve širokega razpona krajevnih in časovnih skal v teh sistemih. Po drugi strani, mehanika kontinuumov, ki opisuje dinamiko tekočin z Navier-Stokesovo enačbo, dovoljuje modeliranje tekočinskih tokov na veliko večjih/daljših krajevnih in časovnih skalah. Na manjših krajevnih skalah (nekaj molekularnih premerov) pa standardni opis robnih pogojev, ki jih potrebujemo pri reševanju Navier-Stokesove enačbe, in s tem kontinuumski opis ne veljata več. Razvoj hibridnih atomistično-kontinuumskih metod pa lahko premosti omejitve obeh pristopov, t.j., simulacije molekulske dinamike in mehanike kontinuumov. V teh hibridnih shemah tekočino modeliramo s simulacijo molekulske dinamike samo v domenah, kjer res potrebujemo atomsko krajevno resolucijo, v ostanku sistema pa uporabljamo kontinuumski opis. Takšne večskalne pristope so uspešno uporabili za študij sistemov trdne snovi. V primeru tekočin pa je bila njihova uporaba pred začetkom tega projekta omejena na pline in enostavne tekočine, npr. Lennard-Jonesovo tekočino in vodo. Težava pri uporabi teh pristopov za kompleksne tekočine leži v vstavljanju molekul tekočine v

gosto tekočino, kar je potrebno za izenačitev masnih tokov in tokov gibalne tekočine čez mejno steno.

V okviru projekta smo dosegli:

1. Kot prvi na svetu smo s sodelavci iz ETH Zurich izvedli večskalno simulacijo toka vode mimo molekule fullerena s polno 3D sklopitvijo med mikro in makroskopskim opisom tekočine. Uporabili smo Schwarzovo metodo, ki sklaplja simulacijo molekulske dinamike (MD) tekoče vode okrog C540 molekule z Lattice-Boltzmann (LB) opisom Navier-Stokesovih enačb. Predstavljena metoda, ki smo jo vgradili v računski paket Fasttube, implicitno ohranja toka mase in gibalne količine in premošča algoritme osnovane na ohranitvi tokov in prekrivalne algoritme Schwarzovega tipa. Novi pristop uporabimo za določitev robnih pogojev na površini molekule fullerena. Z našim večskalnim pristopom lahko simuliramo tekočinske tokove okrog nanoobjektov, kar je izrednega pomena za hidrodinamiko v ograjenih geometrijah (npr. ciljni dostavi zdravil), kjer robni pogoji znatno vplivajo na tekočinski tok. Članek je bil objavljen v: *J. comput. phys.*, 2012, vol. 231, iss. 7, str. 2677-2681 [COBISS.SI-ID [4876826](#)].

2. Izvedli smo tudi kontinuumsko simulacijo toka vode mimo molekule fullerena. Robne pogoje na površini molekule, ki smo jih določili z uporabo večskalne simulacije, v kateri sklapljamo simulacijo molekulske dinamike za opis tekočinskega toka blizu molekule s kontinuumskim opisom daleč stran od molekule, uporabimo v izključno kontinuumskih simulacijah. Pri tem uporabimo zdrso dolžino in hidrodinamski radij, ki določata tako imenovane partial-slip robne pogoje, za opis tekočinskega toka, ki ga določimo z reševanjem Navier-Stokesovih enačb z metodo končnih volumnov. Rezultati naših simulacij potrjujejo našo tezo, da rešitev leži med rešitvama, ki ustrezata no-slip in full-slip robnim pogojem. Hkrati pokažemo, da lahko uporabimo kontinuumski opis tudi na nanoskali, če le poznamo robne pogoje, ki znatno vplivajo na obliko tekočinskega toka v ograjenih geometrijah. Članek je sprejet v reviji EPJ ST.

3. Izvedli smo kontinuumsko simulacijo vodnega toka skozi membrano nanocevk. Eksperimenti in simulacije molekulske dinamike so pokazali, da membrane ogljikovih nanocevk omogočajo izjemno visoke tokovne pretoke. Pokazali smo, da lahko te vodne pretoke opišemo tudi s kontinuumsko Navier-Stokesovo enačbo z ustreznimi robnimi pogoji. Robne pogoje definira zdrsa dolžina, ki smo jo izluščili iz simulacij molekulske dinamike. Pokazali smo, da se rezultati s kontinuumsko metodo ujemajo s simulacijo molekulske dinamike, ki je računsko za približno dva reda velikosti zahtevnejša. To nam bo omogočilo študij membran dolgih ogljikovih nanocevk, ki so izven dosega simulacij molekulske dinamike in tako služijo za nadaljnje validiranje eksperimentov vodnega pretoka skozi debele membrane ogljikovih nanocevk. Ustrezen članek je objavljen v:

POPADIĆ, Aleksandar, WALTHER, Jens H., KOUMOUTSAKOS, Petros, PRAPROTNİK, Matej. Continuum simulations of water flow in carbon nanotube membranes. *New journal of physics*, ISSN 1367-2630. [Online ed.], Aug. 2014, vol. 16, no. 8, str. 1-11. [COBISS.SI-ID [5529626](#)],

4. Razvili smo simulacijski pristop za odprte simulacije mehke snovi in molekularnih tekočin. Ta večskalni pristop temelji na izmenjavi tokov gibalne količine med delčno (simulacija molekulske dinamike) in kontinuumsko (Navier-Stokes enačba) domeno. Naša metoda omogoča vstavljanje kompleksnih molekul v atomistično domeno preko grobozrnatega opisa in dovoljuje izvajanje molekularnih simulacij v velekanoničnem statističnem ansamblu oziroma pod neravnovesnimi pogoji. Najprej smo izvajali odprte simulacije Lennard-Jones tekočine, rezultate pa primerjali z ustreznimi standardnimi zaprtimi simulacijami z uporabo Lee-Edwardsovih robnih pogojev. Nato smo razvito metodologijo uporabili na odprti simulaciji zvezdastih polimerov, kjer smo odprli molekularni sistem tako, da le-ta izmenjuje tokova mase in gibalne količine s svojo okolico. Članek je sprejet v objavo v reviji EPJ ST.

5. Vzporedno metodo AdResS, ki smo jo vgradili v računski paket Espresso++, smo uporabili

za simulacije raztopine soli. Pri simulacijah raztopin potrebujemo velike sisteme zaradi nizke koncentracije ionov. Novo razvita metodologija omogoča časovno daljše simulacije večjih molekularnih sistemov, kar znatno poveča učinkovitost simulacije molekulske dinamike za študij strukturnih dinamičnih in termodinamičnih lastnosti mehke snovi in molekularnih tekočin. Članek je objavljen v:

BEVC, Staš, JUNGHANS, Christoph, KREMER, Kurt, PRAPROTNIK, Matej. Adaptive resolution simulation of salt solutions. *New journal of physics*, 2013, vol. 15, no. 10, str. 1050071-10500712. [COBISS.SI ID 5301530]

6. Izvedli smo molekularno simulacijo s prilagodljivo ločljivostjo proteina G v vodi. Sklopili smo atomistični model vode okrog proteina z mezoskopskim modelom vode, v katerem so štiri molekule vode predstavljene kot en grobozrnat delec. Molekule vode spreminjajo resolucijo iz štirih molekul v en grobozrnat delec in nazaj adaptivno v letu. Iz 15ns dolgih izračunanih trajektorij znotraj naše napake nismo opazili razlik v strukturnih in dinamičnih lastnosti proteina med našim večskalnim pristopom in popolnoma atomistično simulacijo. Pripadajoči izvorni znanstveni članek je objavljen v:

ZAVADLAV, Julija, NUNO MELO, Manuel, MARRINK, Siewert J., PRAPROTNIK, Matej. Adaptive resolution simulation of an atomistic protein in MARTINI water. *The Journal of chemical physics*, 2014, vol. 140, iss. 5, str. 0541141-0541144., doi: 10.1063/1.4863329. [COBISS.SI ID 5421082]

Še en članek s podrobnostmi vpliva našega večskalnega pristopa na strukturne in dinamične lastnosti vode pa je objavljen v:

ZAVADLAV, Julija, NUNO MELO, Manuel, VICENTE CUNHA, Ana, DE VRIES, Alex H., MARRINK, Siewert J., PRAPROTNIK, Matej. Adaptive resolution simulation of MARTINI solvents. *Journal of chemical theory and computation*, ISSN 1549-9618, Jun. 2014, vol. 10, iss. 6, str. 2591-2598., doi: [10.1021/ct5001523](https://doi.org/10.1021/ct5001523). [COBISS.SI-ID [5465114](https://doi.org/10.1021/ct5001523)].

7. Predstavili smo mrežno računalniško orodje STOCK za izvajanje grobozrnatih molekularnih simulacij. Nabor orodij vsebuje strukturni mapper za preslikavo iz finih v grobozrnatih molekularne modele in Boltzmannovo inverzno metodo za določanje učinkovitih intermolekularnih interakcijskih potencialov med grobozrnatimi molekulami. STOCK je dosegljiv na <http://stock.cmm.ki.si>. Članek je objavljen v:

BEVC, Staš, JUNGHANS, Christoph, PRAPROTNIK, Matej. STOCK : structure mapper and online coarse-graining kit for molecular simulations. *Journal of computational chemistry*, ISSN 0192-8651, Mar. 2015, vol. 36, iss. 7, str. 467-477, doi: [10.1002/jcc.23806](https://doi.org/10.1002/jcc.23806). [COBISS.SI-ID [37695493](https://doi.org/10.1002/jcc.23806)]

7. Nadaljujemo s študijem različnih tekočerkristalnih faz molekul DNK. Za razlago eksperimentalnih opažanj, da tekoči kristal DNK gre skozi vrsto faznih prehodov z večanjem koncentracije molekul DNK, smo skonstruirali dva začetna sistema. Prvi sistem vsebuje molekule DNK v heksagonalni fazi, medtem ko so v drugem molekule DNK v ortorombski fazi. Za oba sistema bomo izračunali osmotski tlak kot funkcijo medsebojne razdalje molekul DNK. Osmotski tlak lahko določimo z izračunom sile, ki jo delci izvajajo na polprepustno membrano (steno). V naših primerih bo stena omejevala območje z molekulami DNK. Osmotski tlak lahko izračunamo tudi na alternativen način preko potenciala srednje sile. V ta namen bomo izvedli dodatne simulacije, kjer bomo zamrznili razdalje med molekulami DNK z uporabo vezi. Sila te vezi je v neposredni povezavi s potencialom srednje sile in na ta način osmotskim tlakom. Vse simulacije izvajamo z večskalnim pristopom, kjer so same molekule DNK in topilo v neposredni okolici predstavljene z atomističnim, topilo daleč stran pa z grobozrnatim modelom. Za minimizacijo stranskih učinkov končne velikosti sistema bomo večali velikost simulacijskega sistema do konvergence rezultatov. Trenutno vse opisane simulacije, ki so izredno računsko zahtevne tečejo na naši računalniški gruči VRANA. Pričakujemo, da se bodo krivulje osmotskega tlaka v odvisnosti od razdalje kvalitativno ujemale z ustreznimi eksperimentalni krivuljami.

Rezultati simulacij naj bi tudi nakazali, kje lahko pričakujemo točko faznega prehoda med heksagonalno in ortorombsko fazo.

8. Analitično smo tudi analizirali prehod med vijačnico in ravno verigo v eksplicitnih topilih z uporabo spinskih modelov. Ustrezen članek je:

BADASYAN, Artem V., TONoyAN, Sh. A., GIACOMETTI, Achille, PODGORNİK, Rudolf, PARSEGIAN, Vozken Adrian, MAMASAKHLISOV, Yevgeni S., MOROZOV, Vladimir. Unified description of solvent effects in the helixcoil transition. Physical review. E, Statistical, nonlinear, and soft matter physics, ISSN 15393755, 2014, vol. 89, iss. 2, str. 0227231-02272310, [COBISS.SIID 2645348]

9. Študirali smo značilnosti porazdelitve naboja na virusnih kapsidah, ter energije in tlake v virusih.

Naše raziskovalno delo smo predstavili v obliki vabljenih predavanj na mednarodnih konferencah.

#### 4. Ocena stopnje realizacije programa dela na raziskovalnem projektu in zastavljenih raziskovalnih ciljev<sup>3</sup>

Cilji projekta so bili:

a) Izpeljava hibridne atomistične- kontinuumске metode za goste tekočine. V našem pristopu bomo uporabili dva različna pristopa. V prvem bomo uporabili hibridno shemo, ki izenačuje tokove fizikalnih količin čez mejno steno. Navier-Stokesovo enačbo bomo reševali z metodo končnih prostornin. Ta shema dovoljuje obravnavo stisljivih tekočinskih tokov in je primerna za študij vpliva tekočinskega toka na molekularno domeno. V drugem pristopu bomo uporabili Schwarzovo metodo, v kateri v prekrijevalni domeni izmenjujemo atomistični in kontinuumski opis, dokler ne dosežemo stacionarnega stanja. V tej shemi bomo Navier-Stokesovo enačbo reševali z metodo Lattice-Boltzmann. Ta pristop je primeren za obravnavo nestisljivih tekočinskih tokov in obravnavo vpliva molekularne domene na tekočinski tok. Obe shemi bomo združili z delčno metodo, ki dovoljuje fleksibilno sklapljanje atomističnega in grobozrnatega opisa tekočine. Osnovna ideja našega pristopa je v sklopitvi atomistične in kontinuumске hidrodinamike preko grobozrnatega modela, kar bo dovoljevalo vstavljanje molekul tekočine v gosto tekočino.

b) Izpeljane hibridne metode bomo uporabili za študij pojavov, ki vključujejo večskalno interakcijo med tekočinskim tokom in materijo. Pri tem bomo študirali tako vpliv tekočinskega toka na izbrano molekularno domeno kot tudi obratni vpliv molekularne domene na tekočinski tok.

c) Z razširitvijo atomističnega modela s kontinuumskim opisom "odpremo" molekularno domeno, ki tako izmenjuje molekule z okolico. To omogoča izvajanje simulacij molekulske dinamike v velekanoničnem statističnem ansamblu. V tem projektu bomo izvajali velekanonične simulacije molekulske dinamike kompleksnih tekočin in materialov, npr. taline zvezdastih polimerov. Prav tako bomo preučevali njihovo obnašanje pri različnih deformacijah. Takšni materiali imajo namreč zanimivo obnašanje pri elastičnih in plastičnih deformacijah, ki ga še ne razumemo povsem zadovoljivo na molekularni skali in ga lahko proučujemo z zgoraj opisano metodologijo.

d) Vgradnja izpeljanih metod v programska paketa ESPReso++ (MPIP, Mainz) in Fasttube (ETH, Zurich) za večskalne simulacije. To bo omogočilo dostop razvitih metod do širokega kroga uporabnikov.

Iz točke 3. je razvidno, da smo realizirali **vse** zastavljene cilje projekta:

a) Izpeljali smo hibridni metodi, ki sklapljata atomistično in kontinuumsko hidrodinamiko: za

stisljive (izmenjava tokov) in drugo za nestisljive tekočine (Schwarzova sklopitev).

b) Z razvitimi metodami smo študirali vodne tokove mimo in skozi nanodelce (fulerene in membrane ogljikovih nanocevk). Prav tako smo študirali strukturne lastnosti taline zvezdastih polimerov pod strigom z odprto simulacijo molekulske dinamike.

c) Novo razvite metode smo vgradili v paket ESPResSo++, *Comp. phys. commun.*, 2013, vol. 184, issue 4, str. 1129-1149. [COBISS.SI-ID [5164058](#)] in Fasttube, kar omogoča njihovo uporabo široki množici uporabnikov.

#### 5. Utemeljitev morebitnih sprememb programa raziskovalnega projekta oziroma sprememb, povečanja ali zmanjšanja sestave projektne skupine<sup>4</sup>

Ni bilo sprememb programa raziskovalnega projekta. V zadnjem letu tudi ni bilo sprememb, povečanja ali zmanjšanja sestave projektne skupine.

#### 6. Najpomembnejši znanstveni rezultati projektne skupine<sup>5</sup>

Znanstveni dosežek			
1.	COBISS ID	5529626	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Kontinuumske simulacije vodnega toka v membranah ogljikovih nanocevk
		ANG	Continuum simulations of water flow in carbon nanotube membranes
	Opis	SLO	Predlagamo uporabo Navier-Stokesovih enačb z uporabo robnega pogoja z delnim zdrsom za simulacijo vodnih tokov v membranah ogljikovih nanocevk.
		ANG	We propose the use of the Navier–Stokes equations subject to partial slip boundary conditions to simulate water flows in Carbon NanoTube (CNT) membranes. The finite volume discretizations of the Navier–Stokes equations are combined with slip lengths extracted from molecular dynamics (MD) simulations to predict the pressure losses at the CNT entrance as well as the enhancement of the flow rate in the CNT. The flow quantities calculated from the present hybrid approach are in excellent agreement with pure MD results while they are obtained at a fraction of the computational cost. The method enables simulations of system sizes and times well beyond the present capabilities of MD simulations. Our simulations provide an asymptotic flow rate enhancement and indicate that the pressure losses at the CNT ends can be reduced by reducing their curvature. More importantly, our results suggest that flows at nanoscale channels can be described by continuum solvers with proper boundary conditions that reflect the molecular interactions of the liquid with the walls of the nanochannel.
	Objavljeno v	Institute of Physics Publishing; Deutsche Physikalische Gesellschaft; New journal of physics; 2014; Vol. 16, no. 8; str. 1-11; Impact Factor: 3.671; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.852; A': 1; WoS: UI; Avtorji / Authors: Popadić Aleksandar, Walther Jens H., Koumoutsakos Petros, Praprotnik Matej	
Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek		
2.	COBISS ID	5301530	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Simulacija adaptivne ločljivosti solnih raztopin
		ANG	Adaptive resolution simulation of salt solutions
	Opis	SLO	V članku predstavimo aplikacijo metode simulacije s prilagodljivo resolucijo AdResS za solne raztopine. Večskalna metoda AdResS omogoča dinamično spreminjanje molekularne ločljivosti preko sklopitve atomističnih in grobozrnatih modelov tekočin. V ta namen razvijemo grobozrnat model

			<p>solni za uporabo s klasičnimi polji sil in izpeljemo termodinamske sile, ki omogočajo termodinamično ravnovesje molekularnih vrst čez simulacijsko škatlo.</p>
		ANG	<p>This paper reports the application of the adaptive resolution scheme (AdResS) for simulating aqueous salt solutions. The concurrent multiscale method AdResS allows for a dynamical change of molecular resolution by coupling atomistic and coarse-grained models of liquids. To this end, we have developed coarse-grained models of salt to be used with standard atomistic force fields and derive thermodynamic forces to ensure the thermodynamic equilibrium distribution of all molecular species across the simulation box.</p>
	Objavljeno v		<p>Institute of Physics Publishing; Deutsche Physikalische Gesellschaft; New journal of physics; 2013; Vol. 15, no. 10; str. 105007-1-105007-12; Impact Factor: 3.671; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.852; A': 1; WoS: UI; Avtorji / Authors: Bevc Staš, Junghans Christoph, Kremer Kurt, Praprotnik Matej</p>
	Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek
3.	COBISS ID	5421082	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Simulacija atomističnega proteina v vodi MARTINI z metodo prilagodljive ločljivosti
		ANG	Adaptive resolution simulation of an atomistic protein in MARTINI water
	Opis	SLO	<p>Izvedli smo MD simulacijo s prilagodljivo ločljivostjo proteina G v vodi. Sklopili smo atomistični model vode okrog proteina z mezoskopskim modelom vode, v katerem so štiri molekule vode predstavljene kot en grobozrnat delec. Molekule vode spreminjajo resolucijo iz štirih molekul v en grobozrnat delec in nazaj adaptivno v letu. Iz 15ns dolgih izračunanih trajektorij znotraj naše napake nismo opazili razlik v strukturnih in dinamičnih lastnosti proteina med našim večskalnim pristopom in popolnoma atomistično simulacijo.</p>
		ANG	<p>We present an adaptive resolution simulation of protein G in multiscale water. We couple atomistic water around the protein with mesoscopic water, where four water molecules are represented with one coarse-grained bead, farther away. The water molecules change their resolution from four molecules to one coarse-grained particle and vice versa adaptively on-the-fly.</p> <p>Having performed 15 ns long molecular dynamics simulations, we observe within our error bars no differences between structural and dynamical properties of the protein in the adaptive resolution approach compared to the fully atomistically solvated model.</p>
	Objavljeno v		<p>American Institute of physics; The Journal of chemical physics; 2014; Vol. 140, iss. 5; str. 054114-1-054114-4; Impact Factor: 3.122; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.414; A': 1; WoS: UH; Avtorji / Authors: Zavavlav Julija, Nuno Melo Manuel, Marrink Siewert J., Praprotnik Matej</p>
	Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek
4.	COBISS ID	2523492	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Ograjeni kiralni polimerni nematiki
		ANG	Confined chiral polymer nematics
	Opis	SLO	<p>Študiramo kondenzacijo dolgih ograjenih nematskih polimerov znotraj sferične kapside, ki je dober model za kondenzacijo DNK znotraj virusne kapside.</p>
			<p>We investigate condensation of a long confined chiral nematic polymer inside a spherical enclosure, mimicking condensation of DNA inside a viral</p>



			capsid. The Landau-de Gennes nematic free-energy Ansatz appropriate for nematic polymers allows us to study the condensation process in detail with different boundary conditions at the enclosing wall that simulate repulsive and attractive polymer-surface interactions. By increasing the chirality, we observe a transformation of the toroidal condensate into a closed surface with an increasing genus, in some respects akin to the ordered domain formation observed in cryo-microscopy of bacteriophages.
	Objavljeno v	Les Ed. de physique; Europhysics letters; 2012; Vol. 100, no. 6; str. 66005-p1-66005-p6; Impact Factor: 2.260; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.685; A': 1; WoS: UI; Avtorji / Authors: Svenšek Daniel, Podgornik Rudolf	
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek	
5.	COBISS ID	5465114	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Simulacija prilagodljive ločljivosti topil MARTINI
		ANG	Adaptive resolution simulation of MARTINI solvents
	Opis	SLO	Predstavimo simulacije prilagodljive ločljivosti polarnih in nopolarnih topil. Ustrezni grobozrnati modeli so kompatibilni s poljem sil MARTINI. Kot predstavnik obeh vrst topil smo izvrili tekočo vodo in butan pri sobni temperaturi. Molekule topila spreminjajo resolucijo med potekom simulacije glede na njihovo pozicijo v sistemu. Naš pristop pravilno reproducira strukturne in dinamične lastnosti ustrezne vseatomske simulacije.
		ANG	We present adaptive resolution molecular dynamics simulations of aqueous and apolar solvents using coarse-grained molecular models that are compatible with the MARTINI force field. As representatives of both classes of solvents we have chosen liquid water and butane, respectively, at ambient temperature. The solvent molecules change their resolution back and forth between the atomistic and coarse-grained representations according to their positions in the system. The difficulties that arise from coupling to a coarse-grained model with a multimolecule mapping, for example, 4 to 1 mapping in the case of the Simple Point Charge (SPC) and MARTINI water models, could be successfully circumvented by using bundled water models. We demonstrate that the presented multiscale approach faithfully reproduces the structural and dynamical properties computed by reference fully atomistic molecular dynamics simulations. Our approach is general and can be used with any atomistic force field to be linked with the MARTINI force field.
	Objavljeno v	American Chemical Society; Journal of chemical theory and computation; 2014; Vol. 10, iss. 6; str. 2591-2598; Impact Factor: 5.310; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.414; A': 1; WoS: EI, UH; Avtorji / Authors: Zavadlav Julija, Nuno Melo Manuel, Vicente Cunha Ana, De Vries Alex H., Marrink Siewert J., Praprotnik Matej	
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek	

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

	Družbeno-ekonomski dosežek		
1.	COBISS ID	5201434	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Adaptivni algoritmi za molekularno simulacijo
		ANG	Adaptive algorithms for molecular simulation
	Opis	SLO	Član komisije za doktorat Svetlane Artemove na Univerzi v Grenoblu, Francija. (Matej Praprotnik)



		ANG	Member of the PhD committee of Svetlana Artemova, University of Grenoble, France. (Matej Praprotnik)
	Šifra	D.03	Članstvo v tujih/mednarodnih odborih/komitejih
	Objavljeno v	S. Artemova]; 2012; Avtorji / Authors: Artemova Svetlana	
	Tipologija	2.08	Doktorska disertacija
2.	COBISS ID		Vir: vpis v poročilo
	Naslov	SLO	Gostujoči raziskovalec na KITPC (Matej Praprotnik)
		ANG	Visiting scientist at KITPC (Matej Praprotnik)
	Opis	SLO	Matej Praprotnik je bil 1 mesec gostujoči raziskovalec na "Kavli Institute for Theoretical Physics China (KITPC) at the Chinese Academy of Sciences, Peking, Kitajska" na programu "Advanced Molecular Simulation Methods in the Physical Sciences". KITPC, ki je bil ustanovljen leta 2006, izvaja bazične raziskave v teoretični fiziki in interdisciplinarnih raziskavah.
		ANG	Matej Praprotnik was a visiting scientist at the "Kavli Institute for Theoretical Physics China (KITPC) at the Chinese Academy of Sciences, Peking, Kitajska" on the program "Advanced Molecular Simulation Methods in the Physical Sciences".
	Šifra	B.05	Gostujoči profesor na inštitutu/univerzi
	Objavljeno v	Kavli Institute for Theoretical Physics China at the Chinese Academy of Sciences; 2013	
	Tipologija	3.14	Predavanje na tuji univerzi
3.	COBISS ID		Vir: vpis v poročilo
	Naslov	SLO	Zunanji ocenjevalec za SNSF in ETHZ Research Commission (Matej Praprotnik)
		ANG	External referee for Swiss National Science Foundation (SNSF) and ETHZ Research Commission (Matej Praprotnik)
	Opis	SLO	Znanstveno ocenjevanje raziskovalnih projektov
		ANG	Scientific evaluations of grant applications and research proposals
	Šifra	F.34	Svetovalna dejavnost
	Objavljeno v	Swiss National Science Foundation in ETH Zurich Research Commission, Švica	
	Tipologija	1.19	Recenzija, prikaz knjige, kritika
4.	COBISS ID	1024546132	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Razvoj računalniških orodij za molekularno modeliranje
		ANG	Developing computer tools for molecular modeling: PhD thesis
	Opis	SLO	Izred. prof. dr. Matej Praprotnik je bil mentor dr. Stašu Bevcu pri doktoratu. V doktorski disertaciji predstavimo razvoj računalniških orodij in pristopov za vzporedno večskalno simulacijo molekulske dinamike ter orodje za študijo kinetike encimov.
		ANG	Prof. Matej Praprotnik was an PhD advisor to dr. Staš Bevc. In the PhD thesis he presents the development of computer tools and approaches for parallel multiscale molecular dynamics simulations and a tool for the study of enzyme kinetics.
	Šifra	D.09	Mentorstvo doktorandom
	Objavljeno v	[S. Bevc]; 2013; X, 93 str.; Avtorji / Authors: Bevc Staš	
	Tipologija	2.08	Doktorska disertacija
5.	COBISS ID		Vir: vpis v poročilo

Naslov	SLO	Pridruženi profesor (Rudolf Podgornik)
	ANG	Adjunct professor (Rudolf Podgornik)
Opis	SLO	Pridruženi profesor, Department of physics, University of Massachusetts, Amherst
	ANG	Adjunct professor, Department of physics, University of Massachusetts, Amherst
Šifra	B.05	Gostujoči profesor na inštitutu/univerzi
Objavljeno v	University of Massachusetts, Amherst	
Tipologija	3.14	Predavanje na tuji univerzi

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

1. Journal of biological physics. Podgornik, Rudolf (glavni in odgovorni urednik 2013). Amsterdam: Kluwer Online, 1997. ISSN 00920606. [COBISS.SI ID 2702868]  
Urednik: prof. dr. Rudolf Podgornik

Mentor: prof. dr. Rudolf Podgornik:

2. LOŠDORFER BOŽIČ, Anže. Interactions & geometry of self assembly in viruslike particles : doctoral thesis. Ljubljana: [A. Lošdorfer Božič], 2013. 178, XXI str., ilustr. [COBISS.SI ID 2549604]

3. ARZENŠEK, Dejan. Physics of colloidal interactions in protein aggregation processes : doctoral thesis. Ljubljana: [D. Arzenšek], 2015. 134 str., ilustr. [COBISS.SI-ID 2777956]

in 7 mentorstev diplomskih nalog.

Mentor: izred. prof. dr. Matej Praprotnik

4. POPADIĆ, Aleksandar. Vodni tok skozi membrano ogljikovih nanocevk : diplomsko delo. Ljubljana: [A. Popadić], 2013. 39 f., ilustr. [COBISS.SI ID 2584676]

5. SABLJIĆ, Jurij. Učinkovita ekvilibracija taline zvezdastih polimerov : diplomsko delo. Ljubljana: [J. Sablić], 2012. 34 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 2466404]

Mentor: doc. dr. Daniel Svenšek: 10 mentorstev diplomskih nalog.

6. Matej Praprotnik je postal član izvršilnega odbora Društva biofizikov Slovenije.

7. Matej Praprotnik je bil 2 meseca član "The Kavli Institute for Theoretical Physics (KITP), University of California, Santa Barbara, ZDA" na programu "Physical Principles of Multiscale Modeling, Analysis and Simulation in Soft Condensed Matter".

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

### 9.1. Pomen za razvoj znanosti<sup>2</sup>

SLO

Transport nanodelcev skozi tekočino je bistvenega pomena za aplikacije, ki se raztezajo od genskega prenosa, industrijskih premazov do diagnoze in terapije raka. Študij nanodelcev, npr. fulerenov, v vodnem okolju je prototipični problem za omenjene transportne procese. Simulacije omogočajo vpogled v takšne sisteme takrat, ko lahko dosežejo tako atomistične krajevne skale povezane z velikostjo nanodelcev kot tudi mikro/makroskale značilne za tekočinski tok. Simulacije molekulske dinamike, ki omogočajo opis atomskih podrobnosti medfaze med nanodelcem in tekočino, zaradi računske zahtevnosti do nadaljnjega ne moremo

razširiti do makro režima celotnega tekočinskega toka. Po drugi strani pa kontinuumski opis z Navier-Stokesovo enačbo, ki omogoča opis makroskopskega obnašanja toka, ne opisuje dovolj natančno tokovnega polja ob sami površini nanodelca.

V našem hibridnem pristopu pa smo združili najboljše lastnosti iz obeh zgoraj opisanih pristopov, torej tako zmožnost opisa celotnega tekočinskega toka kot tudi natančne robne pogoje okrog nanodelcev. Predvidevamo, da bodo večskalne simulacije v smeri našega pristopa doprinesle k dragocenim dognanjem, ki bodo prispevala nadaljnjemu razvoju na stičišču znanstvenih disciplin kot so mehanika tekočin, medicina in nanotehnologija.

ANG

The transport of nanoparticles through fluids is essential for applications ranging from gene delivery, to industrial coatings and diagnosis and therapy in cancer. The study of nanoparticles, e.g., fullerenes, in aqueous environments is a prototypical problem for such transport processes. Simulations can provide insight into such systems when they can access, both, the atomistic length scales associated with size of the solute molecules and the micro/macro scales characteristic of the carrier flow field. Simulations using Molecular Dynamics (MD) can capture the atomistic details of the nanoparticle-liquid interface but due to their computational cost they cannot be extended, in the foreseeable future, to the macroscale regime of the full flow field. In turn continuum descriptions, using the Navier- Stokes (NS) equations may capture the macroscale behavior of the flow but they fail to represent accurately the flow field at the nanoparticle surface.

In our hybrid approach we have combined the best features of both the above approaches, i.e, the ability to capture the macroscopic properties of the flow as well as the accurate boundary conditions around nanoparticles. We envisage that multiscale simulations along the lines of our approach will provide us with valuable insights contributing to further progress at the interface of fields such as fluid mechanics, medicine and nanotechnology.

## 9.2. Pomen za razvoj Slovenije<sup>10</sup>

SLO

V okviru projekta smo razvijali metode in izvajali računalniške hibridne delčno-kontinuumske simulacije za študij večskalnih interakcij med mehko snovjo in molekularnimi tekočinami. Zaradi velikega obsega različnih numeričnih pristopov pri obravnavi tega problema, je potrebno sodelovanje med različnimi skupinami iz različnih znanstvenih področij. Pri tem sodelujemo z vodilnimi skupinami v svetu kot so: Theory group, Max Planck Institute for Polymer Research, Mainz, Nemčija; Chair of Computational Science, ETH Zurich, Zurich, Švica; Departamento Fisica Teorica de la Materia Condensada, Universidad Autonoma de Madrid, Madrid, Španija; Department of Mechanical Engineering, Technical University of Denmark, Lyngby, Danska. S tem sodelovanjem ohranjamo stik slovenske znanosti s samim mednarodnim vrhom raziskav na področju računske znanosti. V Sloveniji sodelujemo tudi z IJS, MF, FMF, BF, FF, FRI (vse UL), PU kot tudi z farmacevtsko industrijo, t.j, z Lekom in Krko.

Razvite metode uporabljamo tudi v pedagoške namene in popularizacijo raziskovalnega in študijskega področja. Člani projektne skupine smo bili tudi mentorji/somentorji pri različnih doktorskih disertacijah s področij: fizika, računalništvo, farmacija in kemija.

Rezultate raziskav objavljamo v najboljših mednarodnih znanstvenih revijah in jih predstavljamo na mednarodnih in domačih znanstvenih konferencah. S tem prispevamo k razpoznavnosti Slovenije in povečanju ugleda slovenske znanosti.

ANG

Within the scope of the project we have developed and carried out computer hybrid particle-continuum simulations to study multiscale interactions between soft matter and fluid flows. Due to the large scope in the different numerical approaches to be applied for the study of these multiscale problems the collaboration between several groups from different scientific fields is required. Here we collaborate with leading international groups such as: Theory group, Max Planck Institute for Polymer Research, Mainz, Germany; Chair of Computational Science, ETH Zurich, Zurich, Switzerland; Departamento Fisica Teorica de la Materia Condensada, Universidad Autonoma de Madrid, Madrid, Spain; Department of Mechanical Engineering,

Technical University of Denmark, Lyngby, Denmark. Through this collaborations we preserve the contact of Slovenian science with the cutting edge research in computational science. We also collaborate with several groups in Slovenia, e.g., IJS, MF, FMF, BF, FF, FRI (UL), PU as well as with pharmaceutical industry, i.e., Lek, a new Sandoz company, and Krka.

The developed methods we also employ for the pedagogical purposes and popularization of the scientific field. The project group members have been also mentors/comentors for several doctoral dissertations in physics, computer science, pharmaceutical science, and chemistry.

The results of our research are published in top international scientific journals and presented at several international and domestic scientific conferences. In this way, we contribute to the promotion of Slovenia and the reputation of Slovenian science.

#### 10. 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	
<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
	<input type="text"/>

	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 upravljaljskih 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 in podoktorske projekte iz gospodarstva!**  
**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 visokošolskega 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"/>	
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"/>	
<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="text"/>	<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>		<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
<b>G.06.</b>	<b>Varovanje okolja in trajnostni razvoj</b>		<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
<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>		<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
<b>G.09.</b>	Drugo:		<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	

**Komentar**

--

**12.Pomen raziskovanja za sofinancerje<sup>11</sup>**

	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			

**13.Izjemni dosežek v letu 2014<sup>12</sup>****13.1. Izjemni znanstveni dosežek**

Izvedli smo kontinuumsko simulacijo vodnega toka skozi membrano nanocevk. Eksperimenti in simulacije molekulske dinamike so pokazali, da membrane ogljikovih nanocevk omogočajo izjemno visoke tokovne pretoke. Pokazali smo, da lahko te vodne pretoke opišemo tudi s kontinuumsko Navier-Stokesovo enačbo z ustreznimi robnimi pogoji. Robne pogoje definira zdrsa dolžina, ki smo jo izluščili iz simulacij molekulske dinamike. Pokazali smo, da se rezultati s kontinuumsko metodo ujemajo s simulacijo molekulske dinamike, ki je računsko za približno dva reda velikosti zahtevnejša. To nam omogoča študij membran dolgih ogljikovih nanocevk, ki

so izven dosega simulacij molekulske dinamike in tako služijo za nadaljnje validiranje eksperimentov vodnega pretoka skozi debele membrane ogljikovih nanocevk. Rezultate naših raziskav smo objavili v reviji New Journal of Physics, kjer so editorji naš članek izbrali med "Highlights of 2014".

### 13.2. Izjemni družbeno-ekonomski dosežek

Prof. Rudolf Podgornik je glavni in odgovorni urednik prestižne znanstvene revije "Journal of Biological Physics".

## 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:*

Kemijski inštitut

Matej Praprotnik

### ŽIG

Kraj in datum:

Ljubljana

12.3.2015

### Oznaka poročila: ARRS-RPROJ-ZP-2015/169

<sup>1</sup> Napišite povzetek raziskovalnega projekta (največ 3.000 znakov v slovenskem in angleškem jeziku) [Nazaj](#)

<sup>2</sup> 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](#)

<sup>3</sup> Realizacija raziskovalne hipoteze. Največ 3.000 znakov vključno s presledki (približno pol strani, velikost pisave 11) [Nazaj](#)

<sup>4</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, napišite obrazložitev. V primeru, da sprememb ni bilo, to navedite. Največ 6.000 znakov vključno s presledki (približno ena stran, velikost pisave 11). [Nazaj](#)

<sup>5</sup> 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](#)

<sup>6</sup> 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](#)

<sup>7</sup> Navedite rezultate raziskovalnega projekta iz obdobja izvajanja projekta (do oddaje zaključnega poročila) v primeru, da katerega od rezultatov ni mogoče navesti v točkah 6 in 7 (npr. ni voden v sistemu COBISS). Največ 2.000 znakov, vključno s presledki. [Nazaj](#)

<sup>8</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>9</sup> Največ 4.000 znakov, vključno s presledki [Nazaj](#)

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

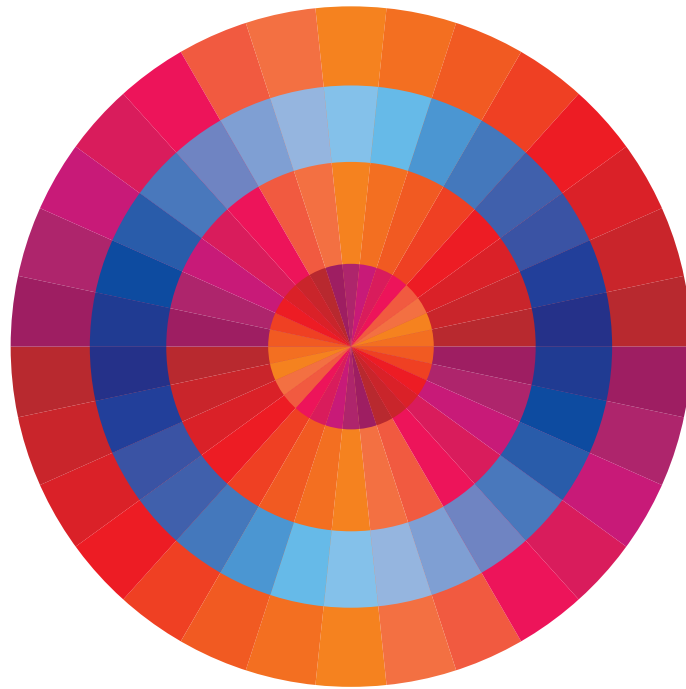
<sup>11</sup> Rubrike izpolnite / prepisite skladno z obrazcem "izjava sofinancerja" <http://www.arrs.gov.si/sl/progproj/rproj/gradivo/>, ki ga mora izpolniti sofinancer. Podpisan obrazec "Izjava sofinancerja" pridobi in hrani nosilna raziskovalna organizacija – izvajalka projekta. [Nazaj](#)

<sup>12</sup> Navedite en izjemni znanstveni dosežek in/ali en izjemni družbeno-ekonomski dosežek raziskovalnega projekta v letu 2014 (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 priponko/-i k temu poročilu. Vzorec diapozitiva je objavljen na spletni strani ARRS <http://www.arrs.gov.si/sl/gradivo/>, predstavitev dosežkov za pretekla leta pa so objavljena na spletni strani <http://www.arrs.gov.si/sl/analize/dosez/>. [Nazaj](#)

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

5C-D5-08-50-3A-D2-CD-82-16-C7-DB-62-74-8C-D3-FE-FE-F9-FE-E7

## **Priloga 1**



# New Journal of Physics

The open access journal at the forefront of physics

**This is to certify that the article**

Continuum simulations of water flow in carbon nanotube membranes  
by **A Popadić, J H Walther, P Koumoutsakos and M Praprotnik**

has been selected by the editors of *New Journal of Physics* for inclusion in the exclusive 'Highlights of 2014' collection. Papers are chosen on the basis of referee endorsement, novelty, scientific impact and broadness of appeal.

**Professor Eberhard Bodenschatz**  
Editor-in-Chief  
*New Journal of Physics*  
[www.njp.org](http://www.njp.org)

Deutsche Physikalische Gesellschaft  DPG | **IOP** Institute of Physics

Image: Phase distributions of Cartesian electric field components, in the image plane of a high numerical aperture double lens system with coincident foci **M R Foreman and P Török** 2011 *New Journal of Physics* **13** 063041.

## **Priloga 2**



