

Oznaka poročila: ARRS_ZV_RPROG_ZP_2008/122

ZAKLJUČNO POROČILO O REZULTATIH RAZISKOVALNEGA PROGRAMA V OBDOBJU 2004-2008

A. PODATKI O RAZISKOVALNEM PROGRAMU

1. Osnovni podatki o raziskovalnem programu

Šifra programa	P1-0002
Naslov programa	Računalniško modeliranje strukture in dinamike molekul
Vodja programa	6734 Dušanka Janežič
Obseg raziskovalnih ur	25.500
Cenovni razred	D
Trajanje programa	01.2004 - 12.2008
Izvajalke programa (raziskovalne organizacije in/ali koncesionarji)	104 Kemijski inštitut

B. REZULTATI IN DOSEŽKI RAZISKOVALNEGA PROGRAMA

2. Poročilo o realizaciji programa raziskovalnega programa¹

Cilji programa:

Razvoj in uporaba metod za molekularno modeliranje:

- simplektične metode za simulacijo molekulske dinamike makromolekul;
- kombinacije metod simulacije molekulske dinamike, analize po normalnih načinih nihanja in kvaziharmonске analize proteinov v raztopinah za študij hidratacije proteinov;
- razvoj in uporaba QM/MM metod;
- razvoj računsko učinkovitih metod za določanje časovno odvisne elektronske strukture molekul na osnovi Kohn-Sham-ove formulacije teorije gostotnih funkcionalov;
- razvoj in aplikacija kvantno kemijskih in klasičnih pristopov za izračun reakcijskih mehanizmov, predvsem za izračun ionskih reakcij izocianidov;
- razvoj in uporaba formalizma RISM;
- razvoj novih in učinkovitih računalniških topologij za povezovanje osebnih računalnikov v gruče.

Center za molekularno modeliranje:

- uporaba metod za molekularno modeliranje;
- programska in strojna oprema za molekularno modeliranje;
- VRANA - Vzporedni Računalnik za Akceleracijo Numeričnih Algoritmov:
<http://www.sicmm.org/vrana/>

Realizacija ciljev programa:

Predvideni cilja programa so bili v obdobju 2004-2008 v celoti realizirani. V okviru dela na našem raziskovalnem programu smo v tem obdobju objavili 74 originalnih znanstvenih

člankov, od tega 69 originalnih znanstvenih člankov v SCI revijah, od katerih jih je 50 v zgornji četrtini SCI področij in od tega jih je 5 v prvi ali drugi reviji na SCI področjih in/ali v reviji z IF > 5. Teh 69 člankov je bilo citiranih 376 krat, od tega je čistih citatov 259, normiranih po ARRS metodologiji pa 153. Število čistih citatov programske skupine v zadnjih 5 letih pa je bilo 817. Med drugim smo imeli tudi, 2 plenarni predavanji in 18 vabljenih predavanj na mednarodnih konferencah, 11 v celoti objavljenih znanstvenih prispevkov na mednarodnih konferencah ter 24 predavanj na tujih univerzah. Objavili smo tudi znanstveno monografijo izdano pri tuji založbi.

Nekateri glavni dosežki so naslednji:

- Razvili smo simplektično metodo SISM za simulacijo molekulske dinamike, ki omogoča šestkratno povečanje integracijskega koraka in s tem šestkratno pohitritev simulacije molekulske dinamike tekoče vode v primerjavi s standardnimi metodami. Z našo metodo je mogoč bolj točen izračun IR spektra vode, ker ne pride do premika normalnih načinov nihanja na račun hitrih vibracijskih nihanj vodikovih vezi, kot je to pri standardnih metodah.
- Razvili smo vzporedne metode za vzporedno računanje simulacije molekulske dinamike s posebnim poudarkom na metodi SISM. To metodo smo priredili za vzporedno računanje na sistemih vzporednih računalniških gruč VRANA in MD-GRAPE procesorjih. Tako smo dosegli 8-kratno pohitritev izvajanja simulacije molekulske dinamike v primerjavi s standardnimi vzporednimi računalniškimi gručami.
- Z uporabo nove simplektične metode (SISM) za simulacijo molekulske dinamike smo študirali temperaturno odvisnost vibracijskega spektra vode. Ugotovili smo, da eksperimentalno ugotovljenega ožanja traku upogiba z naraščanjem temperature MD ne reproducira. Smo pa s tem pristopom uspešno reproducirali vse ostale eksperimentalno ugotovljene spektroskopske lastnosti vode.
- S pomočjo računalniških simulacij smo obravnavali termodinamske lastnosti vode, ki je v neposrednem stiku s proteini, pri čemer je bil glavni poudarek na strukturnih spremembah vode na površini proteinov in vlogi vode pri dinamskem prehodu v proteinu.
- Izpeljali smo proceduro za kolektivno komunikacijo na vzporednih računalniških sistemih sestavljenih iz gruč osebnih računalnikov s pomočjo katere lahko znatno pospešimo izvajanje simulacije molekulske dinamike.
- S pomočjo resonančne teorije, ki sloni na dejstvu, da imata dve aromatični izomeri lahko različno število Kekulejevih struktur in da je izomera z večjim številom Kekulejevih struktur bolj stabilna, smo obravnavali aromatičnost nanocevk.
- Razvili smo DFT pristope za izračun lastnosti elektronske strukture ogljikovih armchair in zig-zag nanocevk. Ugotovili smo, da so armchair strukture manj reaktivne od zig-zag struktur ter da so armchair strukture električni prevodniki, medtem ko so zig-zag strukture polprevodniki.
- Razvili smo algoritme za obravnavo topoloških lastnosti periodičnih fulerenov.
- S pomočjo QM/MM metod smo obravnavali stabilnosti kompleksov različnih konformer netropsina z DNA. Ugotovili smo pomembnost van der Waalsovih interakcij za določanje stabilnosti kompleksov netropsina in DNA.
- S pomočjo ab-initio pristopov smo obravnavali Ugijeve multikomponentne reakcije in ugotovili, da se ion in kation simultano vežeta na izocianid ter da vmesna intermediata nista stabilna.
- Utemeljili smo pomen zveze med obliko potencialnega polja, ki ga ustvarjajo molekule topljenca (biološke makromolekule), in ureditvijo molekul topila (vode). Vpeljali smo dva nasprotujoča si tipa parametrov reda za vodo, ki odražata princip maksimalne lokalne ureditve molekul vode (medsebojna orientacija molekul zaradi vodikovih vezi), in princip maksimalne globalne zgostitve. Pokazali smo, da je ureditev molekul vode ob površini proteinov povezana s prevlado enega izmed obeh principov, ki jo pogojuje oblika potencialnega polja proteina. Strukturo in dinamiko sistema smo simulirali s pomočjo molekulske dinamike. Razvili smo več splošnih metod in uporabnih računalniških programov za analizo strukture in dinamike topila (vode) v neposredni bližini bioloških makromolekul.
- Razvili smo nove parametre za potencialno polje, ki opisuje interakcijo kalcijevih ionov z okolico in pokazali, da je z uporabo modificiranega potencialnega polja za kalcijeva vezavna mesta, mogoče izvajati MD simulacije na veliki časovni skali, ki ohranjajo strukturne elemente aneksina.
- Razvili smo nov algoritem za izračun topilu dostopne molekulske površine (MS) in grafični računalniški program za hojo po molekulski površini. Naš algoritem, čigar časovna zahtevnost raste linearno s številom atomov v molekuli, je primerljiv s podobnimi obstoječimi algoritmi.
- V sodelovanju z Rudjer Bošković inštitutom smo razvili nove pristope za modeliranje na področju QSPR študij.
- V sodelovanju z Univerzo v Cluju smo razvili nove pristope za obravnavo fulerenov s pomočjo operatorskih preslikav.
- V sodelovanju s FFA smo izvedli simulacije molekulske dinamike fosfolipidnih membran.
- Študirali smo povezave med teorijo matrik in teorijo grafov ter uporabo teorije grafov v

kemijski in bio informatiki. Objavili smo znanstveno monografijo z naslovom *Graph Theoretical Matrices in Chemistry*, prvo znanstveno knjigo na področju kemijske teorije grafov, to je veje matematične kemije, ki direktno uporablja matematično teorijo grafov.

- Z uporabo teorije proteinskih grafov smo razvili nov pristop za iskanje funkcijsko pomembnih predelov proteinov, ki je še posebej primeren za iskanje vezavnih mest, s katerimi se proteini povezujejo z drugimi proteini. Novo razviti pristop temelji na primerjavi struktur proteinov, s pomočjo katere je mogoče poiskati v evoluciji strukturno ohranjene površinske aminokisline. Naš pristop napovedovanja vezavnih mest na proteinih, ki napoveduje proteinska vezavna mesta bolj hitro in bolj nepristransko kot druge znane metode, bo pripomogel k iskanju in karakterizaciji ključnih področij na proteinih, na katerih potekajo interakcije protein-protein.

- Končali smo z razvojem novega empiričnega polja sil za simulacijo molekulske dinamike fleksibilne kristalne rešetke alumofosfata $\text{AlPO}_4\text{-34}$. Z razvitim poljem sil smo izvedli simulacijo molekulske dinamike alumofosfata in izračunali Debye-Wallerjeve faktorje ter IR spekter alumofosfata. Pokazali smo, da molekule templata prispevajo k večji stabilnosti kristalne rešetke.

- Razvili smo metodo in programski paket "NMscatt" za računanje spektrov neelastičnega nevtronskega sipanja biomolekul na podlagi klasičnih simulacij. Metoda je služila kot osnovno orodje pri študiju razpiranja baznih parov pri molekuli DNK. Pokazali smo, da lahko z uporabljenim atomskim modelom DNK s potencialnim poljem sil Charmm zelo dobro reproduciramo izmerjeno disperzijsko zvezo za valovanje vzdolž vijačne osi DNK molekule. Ugotovili smo, da vibracijski načini podobni "dihanju" DNK molekule (npr. razmikanje baznih parov) niso lokalizirani na posamezne frekvence, temveč da obstaja zvezno območje (pas) vibracijskih stanj, 50-300 cm^{-1} s takšnim značajem. S pomočjo programskega paketa "NMscatt" smo s sodelavci iz Univerze Heidelberg študirali tudi mrežna nihanja kristaliziranega proteina ribonukleaze. Pokazali smo, da je glavni prispevek k razširitvi Braggovih črt na račun akustičnih fononov.

- V sodelovanju z Max-Planck Institute for Polymer Research, Mainzu, Nemčija smo razvili adaptivno simulacijsko shemo (Adaptive Resolution Scheme), ki omogoča spremembo krajevne resolucije med samim potekom simulacije molekulske dinamike. Metoda omogoča, da poenostavimo fizikalni opis sistema do največje dopustne stopnje. Pri tem pri obravnavi molekularnega sistema ohranimo vse podrobnosti opisa sistema v tistih območjih, kjer je to potrebno. Metodo smo razširili z vključitvijo sil dolgega dosega, t.j., elektrostatskih sil. Ta korak je iz metodološkega vidika izredno pomemben, ker omogoča obravnavo polarnih topil, npr. tekoče vode kot najpomembnejšega topila v naravi. Novo metodo smo uporabili za simulacijo molekulske dinamike generične makromolekule v topilu in na sistemu molekul vode. Pokazali smo tudi, da opisani pristop vodi do koncepta geometrijsko induciranega faznega prehoda in razširitve ekvipartijskega izreka na necele prostostne stopnje.

Izgradili smo več vzporednih računalniških gruč: VRANA 9, 10 in 11. VRANA 11 je sestavljena iz 42 računalnikov, od katerih vsak vsebuje 8 računskih enot, kar pomeni skupno 336 procesorskih elementov s hitrostjo 1.9GHz. Za razvoj zelo hitrega računanja molekulske dinamike pa smo uporabili tudi IBM-ov procesor "Cell", ki je v najcenejši varianti vgrajen v Sony Playstation 3.

Člani programske skupine pa smo bili tudi vseskozi vpeti tako v pedagoško delo, kot v široko mednarodno in domače znanstveno sodelovanje in v delo na industrijskih projektih.

3. Ocena stopnje realizacije zastavljenih raziskovalnih ciljev²

Zastavljeni raziskovalni cilji programa so bili v obdobju 2004-2008 v celoti realizirani.

4. Utemeljitev morebitnih sprememb programa raziskovalnega programa³

5. Najpomembnejši znanstveni rezultati programske skupine⁴

Znanstveni rezultat			
1.	Naslov	SLO	MD integracija & mol. vibracijska analiza I. Novi simplektični integratorji. II. Simulacije ne-linearnih molekul.

		III. IR spekter vode.
	ANG	MD integration & mol. vibrational theory. I. New symplectic integrators. II. Simulation of non-linear molecules. III. The IR spectrum of water.
Opis	SLO	Objavili smo tri zaporedne članke v reviji Journal of Chemical Physics, v katerih smo predstavili in analizirali novo simplektično metodo za simulacijo molekulske dinamike - SISM. Metoda SISM se razlikuje od drugih metod, ki uporabljajo razcepitvene sheme, po uvedbi analitične obravnave visokofrekvenčnih nihanj. S tem pristopom dosežemo uporabo znatno večjega integracijskega koraka in večjo natančnost računanja kot z drugimi metodami istega reda. Posebna vrednost teh del pa je v združitvi dveh pristopov, t.j. simulacije molekulske dinamike in klasične teorije molekulskih vibracij.
	ANG	We have published three consecutive articles in the Journal of Chemical Physics in which we presented and analyzed a new symplectic method for molecular dynamics integration - SISM. The SISM method differs from other splitting methods in that it analytically treats high-frequency vibrations. This allows for a much longer integration step with a greater computational accuracy compared to other methods of the same order. Another value of these of this work is its combining of two approaches, the molecular dynamics simulation and the classical theory of vibrations.
Objavljeno v		JANEŽIČ, D., PRAPROTNIK, M., MERZEL, F. Molecular dynamics integration and molecular vibrational theory. I. New symplectic integrators. JCP, 2005, 122, 174101.
		PRAPROTNIK, M., JANEŽIČ, D.. Molecular dynamics integration and molecular vibrational theory. II. Simulation of non-linear molecules. JCP, 2005, 122,174102.
		PRAPROTNIK, M., JANEŽIČ, D. Molecular dynamics integration and molecular vibrational theory. III. The IR spectrum of water. JCP, 2005, 122,174103.
		JCR IF (2004): 3.105.
Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek
COBISS.SI-ID		3208474
2. Naslov	SLO	Graf-teoretične matrike v kemiji
	ANG	Graph-Theoretical Matrices in Chemistry
Opis	SLO	Monografija na temo uporabe teorije matrik in grafov v matematični kemiji.
	ANG	Monography on matrix and graph theory usage in mathematical chemistry.
Objavljeno v		Dušanka Janežič, Ante Miličević, Sonja Nikolić, Nenad Trinajstić, Graph-Theoretical Matrices in Chemistry, Mathematical Chemistry Monographs, No. 3, 2007, VI 206 pp. ISBN: 86-81829-72-6
Tipologija		2.01 Znanstvena monografija
COBISS.SI-ID		3684634
3. Naslov	SLO	Večskalne simulacije mehke snovi : sprotno spremenljiva resolucija
	ANG	Multiscale simulation of soft matter : from scale bridging to adaptive resolution
Opis	SLO	Pregledni članek o večskalni simulaciji mehke snovi. Pregled čez simulacijske pristope za simulacijo mehke snovi objavljen v prestižni reviji "Annual Review of Physical Chemistry".
	ANG	Review article on multiscale simulation of soft matter. An overview over simulation approaches for simulation of soft matter. The article was published in the prestigious journal of "Annual Review of Physical Chemistry".
Objavljeno v		M. Praprotnik, L. Delle Site, K. Kremer, Multiscale simulation of soft matter: From scale bridging to adaptive resolution, Annu. Rev. Phys. Chem. 59, 545, 2008.

		JCR IF (2007): 9.439
	Tipologija	1.02 Pregledni znanstveni članek
	COBISS.SI-ID	3863834
4.	Naslov	SLO Mrežna dinamika proteinskega kristala
		ANG Lattice dynamics of a protein crystal
	Opis	SLO Calculating neutron and x-ray scattering from large-scale all-atom simulations.
		ANG Izračun nevtronskega in rentgenskega sipanja iz vse atomskih simulacij dolgega dosega.
	Objavljeno v MEINHOLD, Lars, MERZEL, Franci, SMITH, Jeremy C. Lattice dynamics of a protein crystal. Phys. rev. lett., 2007, vol. 99, no. 9, str. 138101-1-138101-4. JCR IF(2007): 6.944	
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek
	COBISS.SI-ID	3794714
5.	Naslov	SLO Novo potencialno polje za simulacijo molekulske dinamike AIPO ₄ -34 molekularnega sita
		ANG New all-atom force field for molecular dynamics simulation of an AIPO ₄ -34molecular sieve.
	Opis	SLO Novo razvito potencialno polje za izračun simulacije molekulske dinamike aluminofosfatov.
		ANG Newly developed force field for molecular dynamics simulation of aluminophosphates.
	Objavljeno v PRAPROTNIK, Matej, HOČEVAR, Stanko, HODOŠČEK, Milan, PENCA, Matej, JANEŽIČ, Dušanka. New all-atom force field for molecular dynamics simulation of an AIPO ₄ -34 molecular sieve. J. comput. chem., 2008, vol. 29, no. 1, str. 122-129. JCR IF (2007): 4.297	
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek
	COBISS.SI-ID	3707418

6. Najpomembnejši družbeno-ekonomsko relevantni rezultati programske skupine⁵

	Družbeno-ekonomsko relevantni rezultat	
1.	Naslov	SLO Molekularno modeliranje - novi pristopi
		ANG Molecular Modeling - A New approach
	Opis	SLO Predstavitev molekularnega modeliranja v Sloveniji in nekaterih naših najboljših rezultatov.
		ANG Molecular Modeling in Slovenia and presentaion of some of our most imporant results.
	Šifra	B.04 Vabljeni predavanja
	Objavljeno v	Lecture in the Section of mathematical, physical and chemical sciences. Zagreb: Croatian Academy of Sciences and Art, February 14, 2006.
	Tipologija	3.14 Predavanja na tuji univerzi
	COBISS.SI-ID	3443482
2.	Naslov	SLO Urednik, Journal of Chemical Information and Modeling, An American Chemical Society Publication, IF(2007)=2.986
		ANG Associate Editor, Journal of Chemical Information and Modeling, An American Chemical Society Publication, IF(2007)=2.986
	Opis	SLO Dr. Dušanka Janežič je od leta 2001 urednica mednarodne znanstvene revije Journal of Chemical Information and Modeling (prej Journal of Chemical Information and Computer Sciences), An American Chemical Society Publication. http://pubs.acs.org/journals/jcisd8/editors.html V letih 2004, 2005 in 2007 je poleg rednega uredniškega dela uredila vsako leto tudi eno tematsko številko.

		ANG	Dr. Dušanka Janežič is from 2001 an Associate Editor of the Journal of Chemical Information and Modeling (formerly Journal of Chemical Information and Computer Sciences), An American Chemical Society Publication. http://pubs.acs.org/journals/jcisd8/editors.html Besides regular editorial work, in 2004, 2005, and 2007, Dr. Janežič also edited a special issue in each of these years.
	Šifra		C.01 Uredništvo tujega/mednarodnega zbornika/knjige
	Objavljeno v		Journal of Chemical Information and Modelin, An American Chemical Society Publication, Associate Editor, http://pubs.acs.org/journals/jcisd8/editors.html
	Tipologija		4.00 Sekundarno avtorstvo
	COBISS.SI-ID		26533125
3.	Naslov	SLO	Podpis triletnega sporazuma o znanstvenem sodelovanju z RIKEN Yokohama Institute, Japonska
		ANG	Three year collaboartive research agreement with RIKEN Yokohama Institute, Japan
	Opis	SLO	Dr. Dušanka JANEŽIČ, Odgovorna nosilka projekta. Collaborative research agreement = Sporazum o znanstveno-raziskovalnem sodelovanju : [Kemijski inštitut in RIKEN Yokohama Institute podpisala tri letni sporazum o znanstveno raziskovalnem sodelovanju]. Ljubljana: Center za molekularno modeliranje, Kemijski inštitut; Yokohama: RIKEN Yokohama Institute [Japan], 6. nov. 2006.
		ANG	Dr. Dušanka JANEŽIČ, Responsible project leader. Collaborative research agreement: The National Institute of Chemistry and the RIKEN Yokohama Institute signed a three-year agreement on scientific collaboration. Ljubljana: Center for Molecular Modeling, National Institute of Chemistry; Yokohama: RIKEN Yokohama Institute [Japan], 6. nov. 2006.
	Šifra		D.01 Vodenje/koordiniranje (mednarodnih in domačih) projektov
	Objavljeno v		http://www.ki.si/
	Tipologija		3.25 Druga izvedena dela
	COBISS.SI-ID		3715098
4.	Naslov	SLO	Molecular modeling - a new approach
		ANG	Molekularno modeliranje - novi pristopi
	Opis	SLO	Objavljeni so novo razviti pristopi molekularnega modeliranja s posebnim poudarkom na prikazu novo razvitih pristopov za napovedovanje proteinskih vezavnih mest in proteinskega sidranja.
		ANG	Published are newly developed molecular molecular modeling aproaches, in particular, newly developed methods for protein binding sites prediction and targeted protein docking.
	Šifra		B.03 Referat na mednarodni znanstveni konferenci
	Objavljeno v		JANEŽIČ, Dušanka, KONC, Janez, PRAPROTNIK, Matej, PENCA, Matej, POLJANEC, Ksenija. Molecular modeling - a new approach. V: SIMOS, Theodore (ur.), MAROULIS, George (ur.). Computation methods in modern science and engineering : proceedings of the International Conference on Computational Methods in Science and Engineering 2007 (ICCMSE 2007). Vol. 2, Part A, (AIP conference proceedings, 963). Melville [NY, USA]: American Institute of Physics, 2007, part A of vol. 2, str. 524-527.
	Tipologija		1.08 Objavljeni znanstveni prispevek na konferenci
	COBISS.SI-ID		3868186
5.	Naslov	SLO	Nagrada Kemijskega inštituta za izjemno doktorsko delo, Kemijski inštitut, Ljubljana, Slovenija, 2004.
		ANG	The National Institute of Chemistry Award of Exceptional Doctoral Work, The National Institute of Chemistry, Ljubljana, Slovenia, 2004.
	Opis	SLO	Dr. Matej Praprotnik je prejel nagrado Kemijskega inštituta za izjemno doktorsko delo, Kemijski inštitut, Ljubljana, Slovenija, 2004.
		ANG	Dr. Matej Praprotnik was awarded The National Institute of Chemistry Award for Exceptional Doctoral Work, The National Institute of Chemistry, Ljubljana, Slovenia, 2004.

Šifra	E.01 Domače nagrade
Objavljeno v	www.ki.si
Tipologija	2.08 Doktorska disertacija
COBISS.SI-ID	2827546

7. Pomen raziskovalnih rezultatov programske skupine⁶

7.1. Pomen za razvoj znanosti⁷

SLO

Razvoj na področju algoritmov za simulacije makromolekularnih sistemov, na osnovi katerih deluje tudi metoda molekulske dinamike, omogoča večjo natančnost računanja in s tem bolj izrabilen 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 proposed 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 proposed 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 could 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. With the prospects offered by the Human Genome Project, the need for predictions of the higher order structure of proteins from the primary structures, which will become available in large numbers, will sharply increase.

The research carried out following this proposal is of great importance to the development of modern simulation techniques which 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.

7.2. Pomen za razvoj Slovenije⁸

SLO

Cilj programa 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 programa je pa predstavljala implementacija novo razvitih metod na vzporednih računalnikih. Pomemben del programa je tudi to, da nam je s tem omogočeno sodelovanje z vodilnimi laboratoriji v svetu na tem področju.

Pri raziskavah, ki jih izvajamo v okviru našega raziskovalnega dela, razvijamo in uporabljamo metode molekularnega modeliranja, s katerimi imamo že veliko dobrih izkušenj in dobrih rezultatov. Izgradili smo tudi več računalniških sistemov imenovanih VRANA. VRANA je kratica za Vzporedni Računalnik za Akceleracijo Numeričnih Algoritmov. To so multiračunalniški sistemi sestavljeni iz osebnih računalnikov povezanih s hitro vzporedno mrežo. Te računalniške sisteme uporabljajo poleg članov naše programske skupine tudi kolegi iz drugih programskih skupin in laboratorijev na Kemijskem inštitutu in tudi kolegi iz drugih inštitucij, kot npr. iz Inštituta Jožef Stefan, Medicinske fakultete, Fakultete za matematiko in fiziko, Biotehnične fakultete, Fakultete za farmacijo, Fakultete za računalništvo in informatiko in drugih. Na teh računalniških sistemih opravimo tudi obveznosti, ki so vezane na računalniško modeliranje in drugo računanje vezano na pogodbe z industrijo, npr. Lek, Krka in druge. Nadalje, poleg zgoraj naštetega, vsakemu od izvajalcev in uporabnikov nudimo dodatno asistenco, ki je vezana od pomoči pri inštalaciji in uporabi programov za molekularno modeliranje do inštalacije računalnikov in skrbi za lokalno računalniško mrežo in drugo.

ANG

The purpose of the program 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 will focus on specific problems of molecular biology, on code development and application, and also on its parallel implementation. An important component of the project will involve close collaboration with the leading laboratories in this research field.

For the studies that we perform as part of our research, we develop and use molecular modeling methods, which have lead to many good results. We have also developed and built several computer systems call CROW (Columns and Rows of Workstations; VRANA in Slovenian). These systems are clusters of personal computers connected with high-speed networking. Besides the members of our program group, collaborators from other program groups and laboratories at the National Institute of Chemistry and from other institutions, such as the Jožef Stefan Institute, Faculty of Medicine, Faculty of Mathematics and Physics, Biotechnical Faculty, Faculty of Pharmacy, Faculty for Computer and Information Science, and others, also use these clusters. We also use these computer systems for computer modeling and other computations for satisfying obligations under contracts with the industry, e.g., Lek, Krka, and others. In addition to all of the above, we offer assistance to users with the installation and use of molecular modeling programs, as well as the installation and maintenance of computers and networks used for molecular modeling.

The National Institute of Chemistry, Center for Molecular Modeling and the RIKEN Yokohama Institute, Japan signed a three-year agreement on scientific collaboration on 6.nov. 2006.

With our scientific quality and other international activity (editor of an international scientific journal, participating and lecturing at international conferences, universities, and institutions) we increase our country's international recognition as well as sustain and enhance its national identity.

8. Zaključena mentorstva članov programske skupine pri vzgoji kadrov⁹

Vrsta izobraževanja	Število mentorstev	Od tega mladih raziskovalcev
- magisteriji		

- doktorati	3	3
- specializacije		
Skupaj:	3	3

9. Zaposlitev vzgojenih kadrov po usposabljanju

Organizacija zaposlitve	Število doktorjev	Število magistrov	Število specializantov
- univerze in javni raziskovalni zavodi	3		
- gospodarstvo			
- javna uprava			
- drugo			
Skupaj:	3	0	0

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

	Ime oz. naslov publikacije, podatkovne informacijske baze, korpusa, zbirke z virom (ID, spletna stran)	Število *
1.	Journal of Chemical Information and Modeling (dr. Dušanka Janežič, urednica od 2001) (http://pubs.acs.org/journals/jcis8/) An American Chemical Society Publication	Obdobje 2004-2008 uredila cca 800 člankov
2.	Journal of Chemical Information and Computer Sciences, Vol. 44, No. 2, 2004 (dr. Dušanka Janežič, urednica in dr. Ante Graovac, gostujoči urednik) (http://pubs.acs.org/journals/jcis8/) An American Chemical Society Publication	objavljenih 20 člankov - tematska številka - prispevki z MATH/COMP/CHEM, Dubrovnik ter posvečena Dr. G.W.A. Milne-ju
3.	Journal of Chemical Information and Modeling, Vol. 45, No. 6, 2005 (dr. Dušanka Janežič, urednica) (http://pubs.acs.org/journals/jcis8/) An American Chemical Society Publication	objavljenih 35 člankov - tematska številka - prispevki z Regional Biophysics Meeting, Zreče
4.	Journal of Chemical Information and Modeling, Vol. 47, No. 3, 2007 (dr. Dušanka Janežič, urednica in dr. Sonja Nikolić, gostujoča urednica) (http://pubs.acs.org/journals/jcis8/) An American Chemical Society Publication	objavljenih 27 člankov - tematska številka - posvečena Akad.Prof.Dr. Nenadu Trinajstić-u
5.	Advances in Chemoinformatics and Computational Methods (ACCM) - Book Series IGI Global, an International Publishing Company (dr. Dušanka Janežič, članica International Editorial Advisory Board-a od novembra 2007) http://www.igi-global.com/bookseries/details.asp?ID=472&v=bs_editorial	Editor-in-Chief: Huma Lodhi ISBN: Pending
6.		
7.		
8.		
9.		
10.		

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

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

Sodelovanje v programski skupini	Število
- raziskovalci-razvijalci iz podjetij	2
- uveljavljeni raziskovalci iz tujine	9
- podoktorandi iz tujine	
- študenti, doktorandi iz tujine	1
Skupaj:	12

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

Člani programske skupine smo bili v obdobju 2004-2008 vključeni v številne mednarodne raziskovalne in razvojne programe, povezave in drugo mednarodno sodelovanje.

1. NATO projekt:

Studies of Elementary Steps of Radical Reactions in Atmospheric Chemistry, NATO, Collaborative Linkage Grant, EST.CLG.977083, dr. Milan Hodošček.

2. COST projekt:

COST projekt D23 z naslovom: Metalaboratories for complex computational applications in chemistry, dr. Milan Hodošček.

3. Bilateralni (financirani) projekti:

Sodelujemo (obdobje 2004-2008) na financiranih bilateralnih projektih, katerih odgovorna nosilka je dr. Dušanka Janežič, z raziskovalci iz naslednjih držav:

a) BI-US/05-06/013: Dr. Bernard R. Brooks, National Institutes of Health, Bethesda, MD

b) Slovenia - Croatia S&T Cooperation 2006-2007: Dr. Sonja Nikolić, Institute Rudjer Bošković, Zagreb

c) Sofinanciranje znanstveno raziskovalnega sodelovanja med RS in Republiko Hrvaško v letih 2007/2008: Dr. Sanja Tomić, Institute Rudjer Bošković, Zagreb

d) Sprejeti slovensko - turški raziskovalni projekti za obdobje 2004-2007: Dr. Gamze Tanoglu, Izmir Institute of Technology, Izmir

e) Sofinanciranje znanstveno-tehnološkega sodelovanja med Republiko Slovenijo in Romunijo v letih 2005 - 2006: Dr. Mircea Diudea, University of Cluj, Cluj

f) Sofinanciranje znanstvenega sodelovanja z Japonsko v obdobju od 01.04.2003 do 31.03.2006 (Dr. Tetsu Narumi, RIKEN Yokohama).

g) Sofinanciranje znanstvenega sodelovanja z Rusijo (Dr. Vladimir Poroikov)

h) Sofinanciranje znanstvenega sodelovanja s Francijo (Dr. Mark Johnson) - PROTEUS (odgovorni nosilec dr. Franci Merzel)

4. Medakademijski (financiran) projekt:

Slovenska akademija znanosti in umetnosti in Hungarian Academy of Sciences: Dr. Dušanka Janežič in Dr. Istvan Lukovits, Chemical Research Center, Hungarian Academy of Sciences, Budimpešta, Madžarska

5. Daljše delovanje tujih znanstvenikov pri nas in naših v tujini (obdobje 2004-2008):

a) Dr. George W.A. Milne iz National Institutes of Health, Bethesda, Maryland (ZDA) je bil od januarja do septembra 2006 gostujoči raziskovalec v okviru naše programske skupine.

b) Dr. Milan Hodošček sodeluje na National Institutes of Health, Bethesda, MD v skupini Prof.Dr. Bernard R. Brooksa kot sorazvijalec svetovno najbolj uporabljanega programskega paketa za molekularno modeliranje - CHARMM (Chemistry at HARvard Molecular Mechanics).

c) Dr. Matej Praprotnik je na podoktorskem izpopolnjevanju na Max-Planck Institute for Polymer Research v Mainzu, Nemčija (2004-2008).

d) Dr. Urban Borštnik je na podoktorskem izpopolnjevanju na University of Zurich, Zurich,

Švica (2008-2009).

e) Dr. Franci Merzel je bil član komisije za zagovor doktorata na TU Delft, NL (2007).

f) Dr. Dušanka Janežič je bila članica komisije za zagovor doktorata na University of Cluj, Cluj, Romunija (2007).

g) Dr. Dušanka Janežič je članica American Chemical Society ter an ACS Representative for Eastern Europe and Asia in urednca pri J. Chem.Info.Model, an ACS Publication.

h) Dr. Dušanka Janežič je članica Izvršilnega odbora Društva Biofizikov Slovenije. Društvo je včlanjeno v International Union for Pure and Applied Biophysics, European Biophysical Societies' Association, International Organization for Medical Physics in v European Federation of Organisations for Medical Physics.

i) Dr. Dušanka Janežič je članica European Society of Mathematical Chemistry.

6. Krajši obiski tujih znastvenikov pri nas: V obdobju 2004-2008 je našo programsko skupino za krajši čas (do enega tedna) obiskalo preko 40 tujih znanstvenikov in profesorjev. Vsi gostje so pri nas tudi predavali.

7. Plenarni predavanji:

a) 6th Southern School on Computational Chemistry : Jackson, Mississippi, ZDA, April 7-8, 2006 - plenarno predavanje.

b) Regional Biophysical Conference, 21-25 August 2007, Balatonfüred, Hungary - plenarno redavanje.

8. Organizacija mednarodnih prestižnih konferenc:

a) JANEŽIČ, Dušanka, PISANSKI, Tomaž, ŽEROVNIK, Janez. Members of organizing committee. The Nineteenth Dubrovnik International Course & Conference on the Interfaces among Mathematics, Chemistry and Computer Sciences. Dubrovnik, June 21-26, 2004.

b) BERLINER, Lawrence J., DIASPRO, Alberto, DALLA SERRA, Mauro, GARAB, Győző, HEMMINGA, Marcus A., KRISTL, Julijana, LAGGNER, Peter, PABST, Georg, PEČAR, Slavko, PODGORNIK, Rudolf, SCHARA, Milan Valter, SIPPL, Manfred, SUPEK, Selma, SVETINA, Saša, ŠTALC, Anton, TOMIČ, Sanja, ŽÄVODSZKY, Péter, ŽEKŠ, Boštjan, ŠTRANCAR, Janez, ŠENTJURC, Marjeta, PETERLIN, Primož, JANEŽIČ, Dušanka, BRUMEN, Milan, NEMEC, Marjanca, ARSOV, Zoran, LOHNER, Karl, KVEDER, Marina, ZIMANYI, Laszlo, GIACOMETTI, Giorgio Mario. Members of scientific and/or organizing committee. Regional Biophysics Meeting 2005. Zreče [Slovenia], March 16-20, 2005.

c) JANEŽIČ, Dušanka, PISANSKI, Tomaž, ŽEROVNIK, Janez. Members or organizing committee. The Twentieth Dubrovnik International Course & Conference on the Interfaces among Mathematics, Chemistry and Computer Sciences. Dubrovnik, June 20-25, 2005.

d) TOMIČ, Sanja, SMITH, David, WADE, Rebecca, JANEŽIČ, Dušanka, PAJEVA, Ilza, RAMEK, Michael, FUNAR-TIMOFEI, Simona. Members of international programme committee. The 2nd Opatija meeting on computational solutions in the life sciences. Opatija [Croatia], 4-9 September 2007.

e) ANDJUS, Pavle, BRUMEN, Milan, JANEŽIČ, Dušanka, ŠTRANCAR, Janez, SVETINA, Saša. Members of scientific advisory board. Regional biophysics conference. Batalonfüred [Hungary], 21-25 August 2007.

9. Raziskave, ki so privedle do bistvenih novosti in/ali novih praks na področju aplikacije (standardi):

a) Programska oprema: KARPLUS, Martin, BROOKS, Bernard R., BROOKS, Charles L., CUI, Quiang, FELLER, Scott, GAO, Jiali, HODOŠČEK, Milan, ICHIYE, Toshiko, MA, Ianpeng, MACKERELL, Alex, NILSSON, Lennart, POST, Carol, ROUX, Benoît. CHARM : comprehensive force field and program for energy calculations. Cambridge [MA, USA]: Harward University, 2002-. 1 el. optični disk (CD-ROM). Sistemske zahteve: Fortran 90, 30 Mb spomina.

b) Programska in strojna oprema: Kemijski inštitut, Center za molekularno modeliranje (Dr. Dušanka Janežič, Dr. Milan Hodošček) in RIKEN Yokohama Institute, High Performance Molecular Simulation Team, Japonska sta podpisala tri letni sporazum o znanstveno raziskovalnem sodelovanju (Collaborative Research Agreement) na področju razvoja namenske strojne in programske opreme za izvajanje simulacij molekulske dinamike bioloških makromolekul. Tovrstno sodelovanje potrjuje, da smo med vodilnimi svetovnimi razvijalci vzporednih računalniških gruč za izvajanje vzporednih simulacij molekulske dinamike velikih sistemov, ki jih uspešno uvajamo v Sloveniji in tako slovenskim raziskovalcem omogočamo dostopnost do vrhunske strojne in programske opreme.

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

Sodelavci naše programske skupine smo vpeti v več industrijskih projektov, ki se v okviru Laboratorija za molekularno modeliranje in NMR spektroskopijo in Centra za molekularno

modeliranje na KI, izvajajo v sodelovanju s firmo Lek, d.d., Raziskave učinkovin. Delamo na področju molekularnega modeliranja na projektih raziskav novih učinkovin na kardiovaskularnem in antiinfektivnem terapevtskem področju.

Industrijski projekt za LEK, d.d. po Pogodbi št. RU-106/2005 (za leta 2006, 2007, 2008):
Uporaba računalniških kapacitet laboratorija L-1 (programska in strojna oprema) za obdelavo NMR spektrov - izvajanja operativnih analitskih nalog za enote v Leku.
Vodi dr. D. Janežič.

V okviru Centra za molekularno modeliranje sodelavci programske skupine pripravljamo projekte za nabavo, izgradnjo, za optimalno, skrbno in zanesljivo delovanje vzporednih računalniških sistemov VRANA s superračunalniško zmogljivostjo. VRANA je kratica za Vzporedni Računalnik za Akceleracijo Numeričnih Algoritmov. To so multiračunalniški sistemi sestavljeni iz osebnih računalnikov povezanih s hitro vzporedno mrežo. Te računalniške sisteme uporabljajo poleg članov naše programske in projektne skupine tudi kolegi iz drugih programskih skupin in laboratorijev na Kemijskem inštitutu in tudi kolegi iz drugih inštitucij, kot npr. iz Inštituta Jožef Stefan, Medicinske fakultete, Fakultete za matematiko in fiziko, Biotehnične fakultete, Fakultete za farmacijo, Fakultete za računalništvo in informatiko in drugih. Na teh računalniških sistemih opravimo tudi obveznosti, ki so vezane na računalniško modeliranje in drugo računanje vezano na pogodbe z industrijo, npr. Lek, Krka in druge. Nadalje, poleg zgoraj naštetega, vsakemu od izvajalcev in uporabnikov nudimo dodatno asistenco, ki je vezana od pomoči pri inštalaciji in uporabi programov za molekularno modeliranje do inštalacije računalnikov in skrbi za lokalno računalniško mrežo in drugo.

Kemijski inštitut, Center za molekularno modeliranje in RIKEN Yokohama Institute, High Performance Molecular Simulation Team, Japonska sta podpisala sporazum o znanstveno raziskovalnem in tehničnem sodelovanju na področju razvoja namenske strojne in programske opreme za izvajanje simulacij molekulske dinamike. V okviru tega projekta nam RIKEN Yokohama Institute, Japonska vsako leto dobavi novo generacijo vzporednega računalnika MD-GRAPE v vrednosti 30.000 EUR.

American Chemical Society, ZDA je od leta 2001 do sedaj svoji urednici Dr. Dušanki Janežič financiral računalniško in drugo potrebno opremo za delovanje ACS Editorial Office-a v Ljubljani v skupni vrednosti preko 50.000 USD. Vsekakor pa ni možno finančno ovrednotiti promocije Slovenije, ko je v vsaki številki J. Chem. Info. Model. od leta 2001 dalje pod rubriko Editors (<http://pubs.acs.org/journals/jcis8/editors.html>) objavljeno:

Dusanka Janezic
National Institute of Chemistry
Hajdrihova 19
SI-1000 Ljubljana
Slovenia
Phone: 386 1 476 03 21
Fax: 386 1 476 03 00
E-mail: dusa@jchim.acs.org

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

Naša programska skupina pogodbeno sodeluje s farmacevtsko tovarno Lek, d.d. že od leta 1993.

Sodelovanje članov programske skupine v pomembnih gospodarskih in državnih telesih:

Dr. Dušanka Janežič je (ali je bila) v obdobju 2004-2008:

1. Članica personalnega jedra polja Računsko intenzivne metode in aplikacije pri ARRS
2. Članica znanstveno-raziskovalnega sveta na področju naravoslovno-matematičnih ved
3. Članica komisije za izbor Podjetnika leta pri reviji Podjetnik

Dr. Franci Merzel je (ali je bil) v obdobju 2004-2008:

1. Prodekan za znanstveno-raziskovalno delo, Visoka šola za tehnologije in sisteme, Novo mesto

Dr. Matej Penca je (ali je bil) v obdobju 2004-2008:

1. Predsednik Upravnega odbora Kemijskega inštituta (imenovan s strani Vlade RS)

2. Član Sveta za visoko šolstvo pri Vladi RS
3. Član komisije NAMARA pri Svetu za visoko šolstvo Vlade RS
4. Član evalvacijske komisije pri Svetu za visoko šolstvo Vlade RS
5. Član Upravnega odbora Visoke šole za podjetništvo, Piran
6. Soustanovitelj in član fundacije UPI (sofinanciranje študija študentom podjetništva)
7. Član Programskega sveta Tehnološkega parka, Ljubljana
8. Član nadzornega sveta GEA Coledge-a, Ljubljana
9. Predsednik nadzornega sveta MKT Print, Ljubljana
10. Predsednik nadzornega sveta GA, d.d., Ljubljana
11. Član odbora za strateški razvoj v naslednjih visoko tehnoloških podjetjih:
 - Bia Separations, d.o.o., Ljubljana (biotehnologija) - spin-off podjetje
 - Zootfly, d.o.o., Ljubljana (računalniške simulacije) - spin-off podjetje
 - Ekliptik, d.o.o., Ljubljana (medicinski pripomočki) - spin-off podjetje
 - Axon, GmbH, Dunaj, Avstrija (razvoj novih zdravil)

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

Naslov	Z računalnikom do vpogleda v strukturo in gibanje molekul
Opis	Poljudno-znanstveno predstavljene osnove molekularnega modeliranja.
Objavljeno v	MERZEL, Franci, JANEŽIČ, Dušanka. Z računalnikom do vpogleda v strukturo in gibanje molekul. Kem. šoli, 2007, let. 19, št. 2, str. 27-30.
COBISS.SI-ID	3711514

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

Naslov	Vzporedni računalniki in molekulska dinamika.
Opis	Poljudno predstavljeni in opisani vzporedni pristopi molekularnega modeliranja in tudi vzporedni računalniki.
Objavljeno v	TROBEC, Roman, JANEŽIČ, Dušanka. Vzporedni računalniki in molekulska dinamika. Novice - IJS (Tisk. izd.). [Tiskana izd.], januar 2007, št. 129, str. 15-17.
COBISS.SI-ID	20522535

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

1.	Naslov predmeta	Molekularno modeliranje
	Vrsta študijskega programa	Univerzitetni doktorski študij Biomedicine
	Naziv univerze/fakultete	Univerza v Ljubljani
2.	Naslov predmeta	Biofizika I in II
	Vrsta študijskega programa	Bolonjski II. stopnja
	Naziv univerze/fakultete	FMF, Univerza v Ljubljani
	Naslov predmeta	Mehanika I in II
	Vrsta	

3.	študijskega programa	Bolonjski I. stopnja
	Naziv univerze/fakultete	VITES, Novo mesto
4.	Naslov predmeta	Osnove molekularnega modeliranja
	Vrsta študijskega programa	Bolonjski I. in II. stopnja
	Naziv univerze/fakultete	FAMNIT, Univerza na Primorskem
5.	Naslov predmeta	Metode za simulacije molekulske dinamike
	Vrsta študijskega programa	Bolonjski I. in II. stopnja
	Naziv univerze/fakultete	FAMNIT, Univerza na Primorskem
6.	Naslov predmeta	Kombinirane metode za kvantno-klasične simulacije
	Vrsta študijskega programa	Bolonjski I. in II. stopnja
	Naziv univerze/fakultete	FAMNIT, Univerza na Primorskem
7.	Naslov predmeta	Izbrane teme iz računalniško intenzivnih metod
	Vrsta študijskega programa	Bolonjski I. in II. stopnja
	Naziv univerze/fakultete	FAMNIT, Univerza na Primorskem

18. Označite potencialne vplive oziroma učinke vaših rezultatov na navedena področja:

	Vpliv	Ni vpliva	Majhen vpliv	Srednji vpliv	Velik vpliv	
G.01	Razvoj visoko-šolskega izobraževanja					
G.01.01.	Razvoj dodiplomskega izobraževanja	☐	☐	☐	☒	
G.01.02.	Razvoj podiplomskega izobraževanja	☐	☐	☐	☒	
G.01.03.	Drugo:	☐	☐	☐	☐	
G.02	Gospodarski razvoj					
G.02.01	Razširitev ponudbe novih izdelkov/storitev na trgu	☐	☐	☐	☒	
G.02.02.	Širitev obstoječih trgov	☐	☐	☐	☒	
G.02.03.	Znižanje stroškov proizvodnje	☐	☐	☐	☒	
G.02.04.	Zmanjšanje porabe materialov in energije	☐	☐	☐	☒	
G.02.05.	Razširitev področja dejavnosti	☐	☐	☐	☒	
G.02.06.	Večja konkurenčna sposobnost	☐	☐	☐	☒	

G.02.07.	Večji delež izvoza	☐	☐	☐	☐	
G.02.08.	Povečanje dobička	☐	☐	☐	☐	
G.02.09.	Nova delovna mesta	☐	☐	☐	☐	
G.02.10.	Dvig izobrazbene strukture zaposlenih	☐	☐	☐	☐	
G.02.11.	Nov investicijski zagon	☐	☐	☐	☐	
G.02.12.	Drugo:	☐	☐	☐	☐	
G.03	Tehnološki razvoj					
G.03.01.	Tehnološka razširitev/posodobitev dejavnosti	☐	☐	☐	☐	
G.03.02.	Tehnološko prestrukturiranje dejavnosti	☐	☐	☐	☐	
G.03.03.	Uvajanje novih tehnologij	☐	☐	☐	☐	
G.03.04.	Drugo:	☐	☐	☐	☐	
G.04	Družbeni razvoj					
G.04.01	Dvig kvalitete življenja	☐	☐	☐	☐	
G.04.02.	Izboljšanje vodenja in upravljanja	☐	☐	☐	☐	
G.04.03.	Izboljšanje delovanja administracije in javne uprave	☐	☐	☐	☐	
G.04.04.	Razvoj socialnih dejavnosti	☐	☐	☐	☐	
G.04.05.	Razvoj civilne družbe	☐	☐	☐	☐	
G.04.06.	Drugo:	☐	☐	☐	☐	
G.05.	Ohranjanje in razvoj nacionalne naravne in kulturne dediščine in identitete	☐	☐	☐	☐	
G.06.	Varovanje okolja in trajnostni razvoj	☐	☐	☐	☐	
G.07	Razvoj družbene infrastrukture					
G.07.01.	Informacijsko-komunikacijska infrastruktura	☐	☐	☐	☐	
G.07.02.	Prometna infrastruktura	☐	☐	☐	☐	
G.07.03.	Energetska infrastruktura	☐	☐	☐	☐	
G.07.04.	Drugo:	☐	☐	☐	☐	
G.08.	Varovanje zdravja in razvoj zdravstvenega varstva	☐	☐	☐	☐	
G.09.	Drugo:	☐	☐	☐	☐	

Komentar¹⁵

Glede na interdisciplinarno naravnost dela na našem programu in široko uporabnost molekularnega modeliranja menimo, da je naš potencialni vpliv oziroma so učinki naših rezultatov na zgoraj naštetih področjih takšni kot navedeno.

G.01

Molekularno modeliranje je nepogrešljivo pri teoretičnih raziskavah v kemiji, molekularni fiziki,

strukturni biologiji, pri razvoju novih materialov itd. Računalniško modeliranje je v svetu zelo uveljavljeno, ne le v znanosti kot mogočen pripomoček za boljše razumevanje lastnosti snovi in korelacije strukture z makrolastnostmi, zlasti biološkimi, ampak tudi v industriji. Prednjači predvsem farmacevtska industrija. Smotrna raba metod molekularnega modeliranja zahteva razumevanje teoretskih osnov, kakor tudi ustrezno izbiro tipa metod za reševanje določenih nalog. Pri tem je nujno dobro poznavanje dosega in zanesljivosti metod, kar je bistveno za vrednotenje in interpretacijo računskih rezultatov.

G.02 in G.03

Pri raziskavah, ki smo jih izvedli v okviru tega raziskovalnega programa, smo razvijali in uporabljali metode molekularnega modeliranja, s katerimi imamo že veliko dobrih izkušenj in dobrih rezultatov. Izgradili smo tudi več računalniških sistemov imenovanih VRANA. VRANA je kratica za Vzpostavljeni Računalnik za Akceleracijo Numeričnih Algoritmov. To so multiračunalniški sistemi sestavljeni iz osebnih računalnikov povezanih s hitro vzporedno mrežo. Te računalniške sisteme uporabljajo poleg članov naše programske skupine tudi kolegi iz drugih programskih skupin in laboratorijev na Kemijskem inštitutu in tudi kolegi iz drugih inštitucij, kot npr. iz Inštituta Jožef Stefan, Medicinske fakultete, Fakultete za matematiko in fiziko, Biotehnične fakultete, Fakultete za farmacijo, Fakultete za računalništvo in informatiko in drugih. Na teh računalniških sistemih opravimo tudi obveznosti, ki so vezane na računalniško modeliranje in drugo računanje vezano na pogodbe z industrijo, npr. Lek, Krka in druge. Nadalje, poleg zgoraj naštetega, vsakemu od izvajalcev in uporabnikov nudimo dodatno asistenco, ki je vezana od pomoči pri inštalaciji in uporabi programov za molekularno modeliranje do inštalacije računalnikov in skrbi za lokalno računalniško mrežo in drugo.

G.05

S svojo znanstveno kvaliteto in drugo mednarodno aktivnostjo (urednik mednarodne revije, delovanje in predavanja na mednarodnih konferencah, tujih univerzah in inštitutih) pa skrbimo tako za razpoznavnost naše države v svetu kot tudi za ohranjanje in razvoj nacionalne identitete.

C. IZJAVE

Podpisani izjavljam/o, da:

- so vsi podatki, ki jih navajamo v poročilu, resnični in točni
- se strinjamo z obdelavo podatkov v skladu z zakonodajo o varstvu osebnih podatkov za potrebe ocenjevanja, za objavo 5., 6. in 7. točke na spletni strani <http://sicris.izum.si/> ter obdelavo teh podatkov za evidence ARRS
- so vsi podatki v obrazcu v elektronski obliki identični podatkom v obrazcu v pisni obliki

Podpisi:

vodja raziskovalnega programa		zastopniki oz. pooblaščen osebe raziskovalnih organizacij in/ali koncesionarjev
Dušanka Janežič	in/ali	Kemijski inštitut

Zaključno poročilo o rezultatih raziskovalnega programa v obdobju 2004-2008

Kraj in datum:

Ljubljana

16.4.2009

Oznaka poročila: ARRS_ZV_RPROG_ZP_2008/122

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

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

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

⁴ Navedite največ pet najpomembnejših znanstvenih rezultatov programske skupine, ki so nastali v času trajanja programa v okviru raziskovalnega programa, ki je predmet poročanja. Za vsak rezultat navedite naslov v slovenskem in angleškem jeziku (največ 150 znakov vključno s presledki), rezultat opišite (največ 600 znakov vključno s presledki) v slovenskem in angleškem jeziku, navedite, kje je objavljen (največ 500 znakov vključno s presledki), izberite ustrezno šifro tipa objave po Tipologiji dokumentov/del za vodenje bibliografij v sistemu COBISS ter napišite ustrezno COBISS.SI-ID številko bibliografske enote.

Navedeni rezultati bodo objavljeni na spletni strani <http://sicris.izum.si/>.

PRIMER (v slovenskem jeziku):

Naslov: Regulacija delovanja beta-2 integrinskih receptorjev s kathepsinom 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., PREMŽL, A., ZAVAŠNIK-BERGANT, T., TURK, B., KOS, J.. Carboxypeptidase cathepsin X mediates $\beta 2$ - integrin dependent adhesion of differentiated U-937 cells. Exp. Cell Res., 2006, 312, 2515-2527, JCR IF (2005): 4.148

Tipologija: 1.01 - Izvirni znanstveni članek

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

⁵ Navedite največ pet najpomembnejših družbeno-ekonomsko relevantnih rezultatov programske skupine, ki so nastali v času trajanja programa v okviru raziskovalnega programa, ki je predmet poročanja. Za vsak rezultat navedite naslov v slovenskem in angleškem jeziku (največ 150 znakov vključno s presledki), rezultat opišite (največ 600 znakov vključno s presledki) v slovenskem in angleškem jeziku, izberite ustrezen rezultat, ki je v Sifrantu raziskovalnih rezultatov in učinkov (Glej: <http://www.rrs.gov.si/sl/gradivo/sifranti/sif-razisk-rezult.asp>), navedite, kje je rezultat objavljen (največ 500 znakov vključno s presledki), izberite ustrezno šifro tipa objave po Tipologiji dokumentov/del za vodenje bibliografij v sistemu COBISS ter napišite ustrezno COBISS.SI-ID številko bibliografske enote. Navedeni rezultati bodo objavljeni na spletni strani <http://sicris.izum.si/>. [Nazaj](#)

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

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

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

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

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

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

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

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

¹⁴ Navedite objavo oziroma prevod (soobjavo) članov programske skupine, povezano s popularizacijo znanosti (Cobiss tip 1.05, 1.21, 1.22, 2.17, 2.19, 3.10, 3.11, 3.12). Napišite naslov (največ 150 znakov vključno s presledki), kratak opis (največ 600 znakov vključno s presledki), navedite, kje je objavljen/a (največ 500 znakov vključno s presledki),

Zaključno poročilo o rezultatih raziskovalnega programa v obdobju 2004-2008

ter napišite ustrezno COBISS.SI-ID številko bibliografske enote. [Nazaj](#)

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

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