

Oznaka poročila: ARRS-RPROJ-ZP-2015/151



ZAKLJUČNO POROČILO RAZISKOVALNEGA PROJEKTA

A. PODATKI O RAZISKOVALNEM PROJEKTU

1. Osnovni podatki o raziskovalnem projektu

Šifra projekta	L7-4161
Naslov projekta	Spektrometer za avtomatizirano karakterizacijo novih spojin z metodo 14N jedrske kvadrupolne resonance
Vodja projekta	18272 Alan Gregorovič
Tip projekta	L Aplikativni projekt
Obseg raziskovalnih ur	7560
Cenovni razred	C
Trajanje projekta	07.2011 - 06.2014
Nosilna raziskovalna organizacija	106 Institut "Jožef Stefan"
Raziskovalne organizacije - soizvajalke	101 Inštitut za matematiko, fiziko in mehaniko 2997 Center odličnosti NAMASTE, zavod za raziskave in razvoj naprednih nekovinskih materialov s tehnologijami prihodnosti
Raziskovalno področje po šifrantu ARRS	7 INTERDISCIPLINARNE RAZISKAVE
Družbeno-ekonomski cilj	13.01 Naravoslovne vede - RiR financiran iz drugih virov (ne iz SUF)
Raziskovalno področje po šifrantu FOS	1 Naravoslovne vede 1.03 Fizika

B. REZULTATI IN DOSEŽKI RAZISKOVALNEGA PROJEKTA

2. Povzetek raziskovalnega projekta¹

SLO

Jedrska kvadrupolna resonanca (JKR) je že nekaj desetletij stara spektroskopska metoda za opazovanje prehodov med energijskimi nivoji kvadrupolnih jeder, ki pa kljub temu ni doživela

takega razmaha, kot njena sestrška metoda NMR, predvsem zaradi velike razpršenosti karakterističnih resonančnih frekvenc. Ta problem za jedro ^{14}N bomo skušali v tem projektu odpraviti z razvojem novega JKR spektrometra, ki bo deloval na območju do 5 MHz. Prednost novega spektrometra pred obstoječimi komercialnimi in nekomercialnimi spektrometri bo kompaktna izvedba ter samostojno delovanje na celotnem frekvenčnem območju. Z novim spektrometrom bo omogočena bistveno lažja in hitrejša JKR karakterizacija novih spojin, to je iskanje vseh JKR resonančnih frekvenc, prav tako, pa bo lažje tudi naknadno preverjanje sestave materialov.

Osrednji težavi, ki se pojavljata pri izdelavi takega spektrometra sta:

- 1.) razpršenost karakterističnih ^{14}N JKR resonančnih frekvenc na relativno širokem območju 0 – 5 MHz (širina resonance, ki jo iščemo je tipično le nekaj 100 Hz), ter**
- 2.) velike razlike v JKR parametrih (relaksacija) različnih spojin, ki terjajo prilagojene merilne protokole.**

Razpršenost frekvenc povzroča predvsem tehnični problem in preprečuje zajemanje celotnega spektra v enem koraku, kot je to v navadi pri JMR in mnogih drugih spektroskopskih metodah. Resonance je potrebno dejansko iskati, kar je zelo zamudno delo. Težava je tudi v razpoložljivi raziskovalni opremi. Komercialni JMR spektrometri, ki se danes večinoma uporabljajo za JKR meritve, namreč ne omogočajo avtomatskega spreminjanja frekvence na tako širokem območju, kar pa pomeni, da jo to potrebno storiti ročno.

Okoli obeh problemov bo tudi organizirano delo v tem projektu in sicer v dveh sklopih. Prvi sklop bo zajemal predvsem razvoj strojne opreme, kjer bo največji izziv predstavljal razvoj Tx/Rx stikala za preklapljanje med sondo ter oddajnikom in sprejemnikom. V tem sklopu bomo v spektrometer integrirali tudi nekatere druge potrebne module, ki se sedaj že uporabljajo a kot samostojne enote. V drugem sklopu bo jedro raziskav potekalo okoli razvoja protokolov in pulznih zaporedij za hitro iskanje ^{14}N JKR resonančnih frekvenc v novih spojinah, kjer želimo čim hitreje preiskati območje od 500 kHz do 5 MHz tako, da zajamemo vzorce z zelo različnimi načini relaksacije. V tem sklopu bomo razvili tudi krajše protokole, za preverjanje prisotnosti točno določenih snovi, na podlagi predhodno določenih resonančnih frekvenc.

Aplikativno vrednost novega spektrometra vidimo predvsem v farmacevtski industriji saj so JKR resonančne frekvence zelo občutljive na molekularno/kristalno strukturo in tako uporabne za kontrolo sestave učinkovin (polimorfizma).

ANG

Nuclear quadrupole resonance (NQR) is a several decades old technique for the observation of energy level transitions in quadrupole nuclei, which is nowadays far less widespread compared to its sister method nuclear magnetic resonance, mainly due to a very broad spectrum of characteristic resonance frequencies. In this project we will attempt to solve this problem for the nucleus ^{14}N and some other nuclei by developing a new NQR spectrometer with a working range up to 5 MHz. The advantage of this new spectrometer over the commercial and some non-commercial systems available today will be a fully automatic operation, in particular including the usually tedious and time consuming adaptation of hardware for different frequencies. The new spectrometer will primarily allow a much easier NQR characterization of new substances, compared to all current solutions. The spectrometer will also allow for a quick confirmation of selected, already NQR characterized substances in unknown samples under investigation.

There are two major problems involved in the development of such a spectrometer:

- 1.) a huge dispersion of the characteristic frequencies, which for ^{14}N span from 0–5 MHz,**
- 2.) big differences of the NQR parameters, mainly those related to relaxation, among various substances.**

The dispersion of frequencies is probably the main technical issue and prevents the acquisition of the whole spectrum in a »single step« as for example in NMR or many other spectroscopic techniques. The resonances have to be literally searched for, which is very time consuming. Another issue with this spread is hardware. The today available commercial NMR hardware,

which is mainly used for NQR, cannot handle such a frequency range by default, so that significant manual modifications are required throughout the experiments.

The work in this project will be organized around the two problems in two parts. Part I (equipment) will involve the activities for the development and construction of the spectrometer, with the main emphasis on the Tx/Rx switch with a broad (500 kHz – 5 MHz) working range. The result should be a spectrometer with all modules, the newly developed and the previously developed, integrated in one case and controlled by a single program. Part II will be devoted to the development of efficient NQR detection pulse sequences and protocols for a time efficient inspection of an unknown sample.

The development of the new spectrometer will be targeted at the polymorphic analysis of solid pharmaceutical substances. However, the new spectrometer will not be limited to the study of polymorphism, many solid phase changes are associated with a change in the NQR frequency as well and can be thus easily detected or studied.

3. Poročilo o realizaciji predloženega programa dela na raziskovalnem projektu²

Delo na projektu je bilo razdeljeno v tri sklope:

S1 - Razvoj eksperimentalne opreme

S2 - Razvoj protokolov in pulznih zaporedij

S3 - Obsežno preverjanje delovanja

S1 - Razvoj eksperimentalne opreme

Ta sklop smo dodatno razdelili na naslednje podsklope:

S1.1 Tx/Rx stikalo

S1.2 "Q-spoiling" vezje

S1.3 Avtomatsko uglaševanje resonančnega kroga

S1.4 Detekcijska tuljava

S1.5 Integracija komponent v enotno ohišje

S1.1 Tx/Rx stikalo

Tx/Rx stikalo je ena izmed ključnih pomanjkljivosti komercialnih in mnogih nekomercialnih spektrometrov, saj so tipično ta stikala namenjena le delovanju v ozkem frekvenčnem območju (pri naših frekvencah 1 oz 2 MHz), medtem ko mi potrebujemo takega, ki bi deloval vsaj na območju med 0.5 - 5 MHz. Za ta namen smo izdelali več stikal, kot predlagano v projektu, a najboljše se je izkazalo stikalo, ki ga v samem projektu nismo predlagali, saj smo ga v literaturi odkrili naknadno (J. L. Engle, *Rev. Sci. Instr.* **49**, 1356 (1978)). To je aktivno stikalo, z uporabo PIN diod, ter širokopasovnim transmisijemskim transformatorjem. Stikalo krmilimo z enim samim TTL pulzom, ki spreminja delovanje transformatorja. Ko PIN diode prevajajo, (TTL = High), je transformator kratko sklenjen, in zato deluje kot navaden transformator, ter prevaja signal iz sonde v predojačevalnik (Rx režim). V nasprotnem primeru, ko pa PIN diode ne prevajajo (TTL = Low), se transformator spremeni v večje induktivno breme, ki uspešno zaščiti predojačevalnik in hkrati prepreči velike izgube vzbujevalne moči (TX režim). Elemente stikala smo tako izbrali, da deluje na območju od 1 MHz pa do najmanj 5 MHz, ter ze vse moči do nekako 100W.

S1.2 "Q-spoiling" vezje

V okviru projekta smo izdelali dve Q-spoiling vezji (Peshovsky et al., *J. Magn. Reson.* **177**, 67 (2005) ter Rudakov et. al., *Instr. Exper. Techn.* **43**, 78 (2000)), a na koncu smo se odločili da v spektrometru tega elementa ne uporabimo. Težava na katero smo naleteli je ta, da se da vezja enostavno optimizirati le za določeno frekvenco, na širšem frekvenčnem območju, ki ga mi želimo, pa je to dosti težje dosegljivo.

S1.3 Avtomatsko uglaševanje resonančnega kroga

V okviru tega podsklopa smo izdelali 2 uglaševalna seta. En uglaševalni set je sestavljen iz dveh vakuumskih kondenzatorjev, ter dveh koračnih motorjev, ki spreminjata kapaciteto kondenzatorjev. Poleg tega set vključuje še končna stikala, ter krmilni element. Koračne motorje lahko krmilimo v "half-Step" načinu, kot tudi v "microstepping" načinu. Pomembna

ugotovitev za ta projekt je, da je "Half-Step" način izjemno stabilen, in omogoča mnogokratno uglasjevanje resonančnega kroga brez preverjanja, česar pa ne moremo trditi za microstep način. Ker preverjanja ne potrebujemo, je presledek med dvema zaporenima frekvencama bistveno manjši (tudi do 100x) in tako omogoča zelo hitro zajemanje širokih spektrov. skoraj zaključena je izdelava tudi uglasjevalnega kompleta z zračnimi kondenzatorji, ki se precej lažje vrtijo od vakuumskih in imajo zato potencialno dosti daljšo življensko dobo.

S1.4 Detekcijska tuljava

Ta podsklop je bil namenjen izdelavi detekcijske tuljave, oziroma več takih tuljav, za uporabo v našem spektrometru. Želja je bila imeti eno tuljavo, ki bi se jo dalo uglasti z vakuumskimi kondenzatorji na celotnem območju. Tako tuljavo smo po več poskusih tudi uspeli izdelati. Z vakuumskimi kondenzatorji (40 pF - 500 pF) jo lahko uglastimo na področju med 1.2 MHz - 4.6 MHz. Če pa dodamo še fiksni keramični kondenzator to območje raztegnemo pod 1 MHz. Da dosežemo tako široko območje smo morali kar se da zmanjšati razdaljo med kondenzatorji in tuljavo. V trenutni verziji sta oba elementa še vedno ločena, a povezana z 10cm koaksialnim kablom.

Pri testiranjih pa se je izkazalo, da je zelo pomembna tudi stabilna temperatura vzorca. Za tuljavo smo izdelali "kriostat", ki ga hladimo/grejemo s silikonskim oljem. Temperaturna stabilnost je boljša kot 0.1 K tudi pri zelo dolgih časih merjenja (>nekaj dni), kar omogoča izjemno natančne meritve.

S1.5 Integracija komponent v eno ohišje.

Cilj projekta je bil tudi integracija vseh komponent v eno samo ohišje. Posamezne komponente so že naročene in večinoma tudi izdelane, a cloten sistem še ni operativen. Pričakujemo da bo v naslednjih 6 mesecih.

S1.6 Razvoj enotnega krmilnega programa

Cilj projekta je bil tudi razvoj enotnega krmilnega programa. To smo tudi naredili in sicer v okolju Visual C#. Program sproti prikazuje rezultate meritev pri trenutni frekvenci, kot tudi sestavlja parcialne spektre skupaj. Zaradi takega načina imamo vseskozi vpogled v kvaliteto spektra in lahko iskanje frekvenc ustavimo takoj, ko smo z rezultatom zadovoljni. Pogosto se namreč zgodi, da frekvence poiščemo prej kot v grobo ocenjenem času.

S2 - Razvoj protokolov in pulznih zaporedij

Ta sklop je smo razdelili na naslednje podsklope:

S2.1 Pulzna zaporedja za sisteme s počasno 14 relaksacijo

S2.2 Pulzna zaporedja za sisteme s hitro 14N relaksacijo

S2.3 Vzbujanje s šibkimi stohastičnimi pulzi

S2.4 Združevanje pulznih zaporedij v učinkovite protokole

S2.5 Protokoli za potrjevanje pristnosti

S2.4 Združevanje pulznih zaporedij v učinkovite protokole

V okviru projekta smo opravili meritve in optimizacije z mnogimi zaporedji iz podsklopov **S2.1**, **S2.2** in **S2.3**, ki jih tukaj ne bomo naštevali. Za projekt daleč najbolj pomembna metoda, ki smo jo tukaj razvili, in je hkrati primerna tako za počasne sisteme kot za hitre in jo sedaj izključno uporabljamo.

Metodo smo poimenovali "Fast Resonance Scanning" (FRS). Pri dosedanjem iskanju resonanc, smo resonančni krog najprej uglasili na določeno frekvenco in nato pri tej frekvenci naredili večje število ponovitev. Pred vsako ponovitvijo pa moramo počakati nekaj časa, ki ga določa vzorec. Ti časi so lahko 1 ms, lahko pa tudi 100 s in več. Ker tega časa vnaprej ne poznamo, naredimo več povprečevanj z različnimi časi. Pri kratkih časih, je meritev hitra, pri dolgih pa ogromno časa zapravimo za čakanje. Naša metoda, FRS, pa pri vsaki frekvenci naredi eno samo meritev in takoj preglasi resonančni krog na naslednjo frekvenco, ter naredi novo meritev. Ko tako preiščemo vse ostale frekvence, se vrnemo nazaj na izhodiščno frekvenco, in vse skupaj ponovimo. Ponoviti moramo od nekaj 10x pa do nekaj 100x, če je vzorca malo. Ker imamo zelo stabilen sistem uglasjevala, je tak obhod relativno kratek. Frekvenčno območje med 1 in 4 MHz prečesemo v ~2 minutah. In za vzorce s precej signala v tem času tudi dobimo spekter. Za vzorce z šibkejšim signalom, pa lahko spekter povprečujemo nekaj ur. Pomembna prednost metode FRS je ta, da nam vnaprej ni potrebno poznati relaksacijskih parametrov, in

je število ponovitev odvisno le od količine vzorca, kar pa poznamo.

S2.5 Protokoli za potrjevanje pristnosti

Pri testiranjih se je izkazalo, da je za aplikativno uporabnost spektrometra dosti bolj pomembno natančno določanje količine neke substance v vzorcu, kot samo potrjevanje, da neka substanca v vzorcu je. Zato smo se odločili narediti več teoretičnih računov tej smeri. Za ta namen smo iz osnovnih enačb za ^{14}N NQR izračunali intenzitete signalov pri različnih pogojih zajemanja: tako za hitre vzorce kot za počasne. Ugotovili smo, da so pulzna zaporedja za počasne vzorce (CPMG) zelo občutljiva na razliko med vzbujevalno in resonančno frekvenco. V kolikor želimo natančne meritve morata ti dve frekvenci sovpadati. Z našim "kriostatom" smo to razliko zmanjšali na manj kot 10 Hz, kar omogoča določanje količine substance v (mešanem) vzorcu z natančnostjo **nekaj 10 mg**, kar je bistveno bolje kot smo pričakovali.

S3 - Obsežno testiranje

V celotnem času razvoja spektrometra smo opravljali različne meritve spektrov, tako za preverjanje, kot tudi za zunanje naročnike. Tukaj bi predvsem omenil sodelovanje s slovenskim farmacevtskim podjetjem Lek. V več primerih smo lahko meritve na njihovih vzorcih opravili v enem popoldnevu, oziroma nekaj dnevih, saj smo za samo iskanje spektrov porabili bistveno manj časa kot nekoč, zato smo se lahko takoj posvetili določanju količini substance v vzorcih, kar farmacijo primarno zanima.

4. Ocena stopnje realizacije programa dela na raziskovalnem projektu in zastavljenih raziskovalnih ciljev³

S1 - Razvoj eksperimentalne opreme - skupaj ~90%

Od pomembnejših sklopov je delno realiziran le podsklop **S1.5 - Integracija komponent v eno ohišje**. Večina elementov je že naročenih oziroma izdelanih. Pričakovano dokončanje v 6 mesecih.

S1.1 Tx/Rx stikalo - 100%

S1.2 "Q-spoiling" vezje - 100%

Vezja so narejena, a niso v standardni uporabi. Uporabljamo jih le v posebnih primerih, ko so relaksacijski parametri na meji merljivega.

S1.3 Avtomatsko ugaševanje resonančnega kroga -100%

S1.4 Detekcijska tuljava -100%

S1.5 Integracija komponent v eno ohišje. - 50%

S1.6 Razvoj enotnega krmilnega programa - 90%

Program je razvit, ni pa še povsem prijazen do uporabnika. Pred iskanjem, je potrebno nastaviti več parametrov, ...

S2 - Razvoj protokolov in pulznih zaporedij - 90%

Razvili smo univerzali protokol za hkratno zajemanje tako "počasnih" kot "hitrih" vzorcev (**S2.4**). Protokol imamo namen patentirati, a to še ni bilo narejeno.

S2.5 Protokoli za potrjevanje pristnosti ~ 100%

Namesto protokolov za potrjevanje pristnosti, smo izdelali protokole za natančno določanje količine učinkovine v vzorcih, tako za hitre kot za počasne metode merjenja. Pristnost vzorca lahko določimo kot s primerjavo nominalne in dejanske določene količine substance v proizvodu.

S3 - Obsežno testiranje ~ 100%

Spektrometer smo testirali ne več deset vzorcih.

5. Utemeljitev morebitnih sprememb programa raziskovalnega projekta oziroma sprememb, povečanja ali zmanjšanja sestave projektne skupine⁴

V eksperimentalni skupini ni bilo večjih sprememb, tudi programa mo se okvirno držali. Vsekakor so pa ostali cilji programa nespremenjeni: izdelava spektrometra.

6. Najpomembnejši znanstveni rezultati projektne skupine⁵

Znanstveni dosežek			
1.	COBISS ID	0	Vir: vpis v poročilo
	Naslov	SLO	Hitro iskanje 14N JKR resonanc
		ANG	"Fast Resonance Scanning" for 14N NQR
	Opis	SLO	Nedvomno največji znanstveni dosežek tega projekta je izdelava in implementacija nove metode za hitro iskanje 14N JKR resonanc. 14N JKR resonance so tipično ozke a razpršene na širokem frekvenčnem območju, pri vsaki posamezni meritvi pa opazujemo le delček tega področja kar je zelo zamudno delo. Poleg tega, je signal šibek in moramo izdatno povprečevati. A ker ne poznamo relaksacijski parametrov, to počnemo neučinkovito. Zaradi tega so prvi poiskusi prečesavanje celotnega področja brez rezultata, tudi če je le ta tam prisotna. Naša metoda to oviro odpravi, saj pri njej najprej spreminjamo frekvenco in nato te spektre povprečujemo. To lahko storimo učinkovito le z zelo hitrim prilagajanjem resonančnega kroga trenutni frekvenci, za kar smo razvili postopek. Pri uporabi našega protokola, je čas iskanja resonance navzgor omejen in sicer s količino vzorca. Tipični časi so nekaj ur, pri ugodnih pogoji pa le nekaj 10 minut.
		ANG	Undoubtly the largest scientific achievement of this project is the development and implementation of a new protocol for Fast 14N NQR Resonance Scanning. The 14N NQR resonances are typically narrow and sparsely distributed on a large frequency interval. At each measurement only a fraction of the spectrum is inspected, so that many steps are required to inspect the whole frequency region. On top of that, the 14N NQR signal is weak and requires extensive averaging. But since the relaxation parameters are not known, averaging is suboptimal. Because of these, most of the scans result in no resonance, even if this is being inspected. Our method overcomes the need to know the relaxation parameters. In essence it reverses signal averaging and frequency scanning. This is being possible if the hardware is fast enough to switch from one frequency to the other. We have managed to build such a system. The maximum time to find the resonance with our protocol is limited only by the amount of sample. Typical times are few hours, whereas in favourable circumstances this can be also only few tens of minutes.
	Objavljeno v	Patentna prijava bo v kratkem vložena	
	Tipologija	2.24 Patent	
2.	COBISS ID	1	Vir: vpis v poročilo
	Naslov	SLO	Kvantitativna interpretacija 14N JKR signala
		ANG	Quantitative interpretation of 14N NQR signal
	Opis	SLO	V okviru projekta smo odkrili, da je za aplikativno uporabo našega spektrometra zelo pomembna natančna interpretacija velikosti NQR signala. V tem članku predstavimo teorijo in eksperimentalne meritve na treh različnih vzorcih, kjer se uporabljajo različna pulzna zaporedja. Povezava med signali in količino materiala je za vsako pulzno zaporedje drugačna,

			poleg tega, pa v nekaterih primerih oblika črte prav tako vpliva na velikost signala, kar sicer ni zaželeno. Na take primere je potrebno biti še posebej pozoren.
		ANG	During the course of this project, we have realised that from the applicational point of view of our spectrometer, it is very important to precisely know the relationship between the NQR signal and the amount of sample. In this article we present both theoretical and experimental results for three cases where different pulse sequences are used. The relationship is different in all three cases in addition, in some cases the relationship depends also on the shape of the resonance, which is very unwanted, but one should definitely be aware of.
	Objavljeno v	Članek odposlan v revijo Journal of Magnetic Resonance	
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek	
3.	COBISS ID	26842663	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	WURST-QCPMG zaporedje in "spin-lock" efekt pri 14N Jedrski kvadrupolni resonanci
		ANG	WURST-QCPMG sequence and "spin-lock" in [sup] (14)N nuclear quadrupole resonance
	Opis	SLO	V članku smo predstavili novo pulzno zaporedje za opazovanje 14N JKR spektra WURST-QCPMG, ki hkrati kombinira prednosti WURST pulzov ter "spin-lock" efekta. WURST pulzi so sestavljeni pulzi, ki omogočajo zelo široko frekvenčno vzbujanje spektra, kar pomeni, da potrebujemo manj korakov pri sestavljanju spektra iz manjši parcialnih spektrov. Poleg tega omogočajo WURST pulzi tudi zmanjšanje potrebne RF moči, kar pomeni manjšo opremo, predvsem RF oddajnik. "spin-lock" efekt, pa je pojav, ki upočasni razpad magnetizacije pri večpulznih zaporedjih (CPMG) v trdni snovi, in lahko zato v določenem času naredimo bistveno več povprečkov meritve, kot če tega pojava ne bi bilo. Izkušnje kažejo, da lahko večinoma razmerje S/N povečamo za faktor 10, glede na eno samo meritev. Ker je 14N JKR signal šibek, je "spin-lock" efekt vitalnega pomena za opazovanje resonanc. Do sedaj še ni bilo znano, ali kombinacija WURST QCPMG sploh deluje. To pulzno zaporedje smo s pridom uporabili tudi v našem spektrometru.
		ANG	We have presented a new pulse sequence, the WURST-QCPMG, for the acquisition of 14N NQR spectra. This sequence combines the advantages of WURST pulses and the "spin-lock" effect. WURST pulses are composite pulses, which allow a very broadband excitation of the spectrum. This is very wellcome when a broad spectrum is being composed of narrower, patial spectra (as in NQR) as it allows to significantly reduce the number of required steps. In addition, WURST pulses also allow to reduce the required RF power, and therefore also to reduce the size of equipement, especially the RF amplifier. The "spin-lock" effect is a phenomenom which slows down the decay of signal during multipulse sequences in solids. Because of this, the signal can be averaged many more times in a given amount of time as compared to when this effect is not present. These averages allow to significantly increase the S/N ratio, which for 14N NQR can be 10 times and even more. Because the 14N NQR signal is always small, the "spin-lock" effect is almost always necessary to obtain acceptable S/N ratios. Before our work, it was not clear wheter the WURST pulse are compatible with "spin-lock". This pulse sequence is being routinely used in our spectrometer.
	Objavljeno v	Academic Press; Journal of magnetic resonance; 2013; Vol. 233; str. 96-102; Impact Factor: 2.315;Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.167; WoS: CO, UH, XQ; Avtorji / Authors: Gregorovič Alan, Apih Tomaž	

	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek	
4.	COBISS ID	17097049	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	14N Jedrska kvadрупolna resonanca polimorfizma famotidina
		ANG	14N Nuclear Quadrupole Resonance study of polymorphism in famotidine
	Opis	SLO	Karakterizacija polimorfizma je ena izmed pomembnih aplikativnih uporab našega spektrometra. V omenjenem članku smo izmerili smo 14N jedrsko kvadрупolno resonanco (JKR) v dveh znanih polimorfih famotidina. Pri sobni temperaturi smo našli sedem setov kvadрупolarnih prehodnih frekvenc $v+$, $v-$, in $v0$, ki ustrezajo sedmim različnim lokacijam dušika v kristalni strukturi vsakega od obeh polimorfov. S tem smo potrdili, da je možno z JKR razlikovati polimorf B od njegovega analoga A. Poleg tega lahko z JKR izmerimo tudi njihov delež v trdni mešanici v končni dozorni obliki, to je tableti. Določili smo JKR frekvence, oblike črt in pogojno tudi položaj vseh sedmih 14N atomov v molekuli. Razvozlanje dveh zapletenih JKR spektrov predstavlja dragocen prispevek k zbirki JKR podatkov in omogoča študij o nekaterih možnih povezav med njimi. Še več, neinvazivne 14N JKR študije komercialnih famotidinskih tablet lahko razkrijejo nekaj podrobnosti o procesu stiskanja med izdelavo zdravil.
		ANG	Characterization of polymorphizem is one important area where our spectrometer finds applicational use. In this article, we have done an 14N NQR research of two known polymorphs of famotidine. At room temperature, seven quadrupolar sets of transition frequencies $v+$, $v-$, and $v0$ corresponding to seven different nitrogen sites in the crystal structure of each of the two polymorphs were found. This confirms the expected ability of NQR to distinguish polymorph B from its analog A. NQR can also measure their ratio in a solid mixture and in the final dosage form, that is, a tablet. The NQR frequencies, line shapes, and tentative assignation to all seven molecular 14N atoms were obtained. Unravelment of these two entangled NQR spectra presents a valuable contribution to the NQR database and enables studies of some possible correlations therein. Moreover, nondestructive 14N NQR studies of commercial famotidine tablets can reveal some details of the drug fabrication process connected with compression.
	Objavljeno v		The Association; Journal of pharmaceutical sciences; 2014; Vol. 103, iss. 9; str. 2704-2709; Impact Factor: 3.007; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.577; WoS: DX, DY, TU; Avtorji / Authors: Lužnik Janko, Pirnat Janez, Jazbinšek Vojko, Lavrič Z., Žagar Veselko, Srčič Stanko, Seliger Janez, Trontelj Zvonko
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek	

7. Najpomembnejši družbeno-ekonomski rezultati projektne skupine⁶

	Družbeno-ekonomski dosežek		
1.	COBISS ID		Vir: vpis v poročilo
	Naslov	SLO	Uporaba spektrometra za komercialne namene
		ANG	The use of the spectrometer for commercial purposes
	Opis	SLO	Projektna skupina ima sklenjeno pogodbo o izvajanju meritev s slovenskim podjetjem LEK. Meritve za ta namen se izvajajo z novo razvitim spektrometrom. Le ta nam omogoča, da frekvence bistveno hitreje najdemo in pa da opravimo zelo natančne meritve. Čeprav smo sodelovali že pred tem projektom, je bilo to težavno, saj smo za iskanje frekvenc, ki zanje niso primarno zanimive, porabili ogromno časa. Sedaj ta čas koristneje

			porabimo za povečanje natančnosti meritve. O vseh izsledkih se izdelajo poročila.
		ANG	The tem of the project has a valid contract with the pharmaceutical company LEK for 14N NQR measurements on pharmaceuticals. These measurements are being done with the newly developed spectrometer. This spectrometer, has a significant advantage over our previous approach, as we find frequencies much faster, and can therefore concentrate on making more accurate measurements. Although we have been working together with the company even before this project, this was somehow problematic, as it took us a lot of time to find the resonances, which are not their primary interest. For all analysis adequate reports have been written.
	Šifra	F.11 Razvoj nove storitve	
	Objavljeno v	Interno	
	Tipologija	2.12 Končno poročilo o rezultatih raziskav	
2.	COBISS ID	27008551	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Magnetno resonančna detekcija eksplozivov in prepovedanih substanc
		ANG	Magnetic resonance detection of explosives and illicit materials
	Opis	SLO	Član projektne skupine je bil urednik zbornika recenziranih znanstvenih prispevkov mednarodne konference v glavnem namanjeni detekciji z metodo 14N jedrsko kvadrupolno resonanco. Na konferenci so sicer svoje prispevke predstavile vse pomembnejše svetovne skupine, ki delujejo na področju 14N JKR.
		ANG	A member of the project team was one of the editors of conference proceedings which was devoted primarily to the detection with 14N NQR. All major groups working in the field of 14N NQR attended the conference.
	Šifra	C.01 Uredništvo tujega/mednarodnega zbornika/knjige	
	Objavljeno v	Springer; 2014; X, 168 str.; Avtorji / Authors: Apih Tomaž	
	Tipologija	2.31 Zbornik recenziranih znanstvenih prispevkov na mednarodni ali tuji konferenci	

8. Drugi pomembni rezultati projektne skupine²

Več članov projektne skupine je aktivno sodelovalo na EU projektu CONPHIRMER (<http://www.conphirmer.com/>), ki je imel kot cilj razviti prenosno napravo za identifikacijo ponarejenih zdravil v carinskih izpostavah z metodo 14N NQR. V projektu CONPHIRMER smo se osredotočili na eno samo zdravilo, in sicer paracetamol, tako da je bil resonančni krog vslej uglasen na eno samo frekvenco.

9. Pomen raziskovalnih rezultatov projektne skupine⁸

9.1. Pomen za razvoj znanosti⁹

SLO

Spektrometer za avtomatizirano 14N NQR relaksacijo smo razvijali z dvema namenoma v mislih:

- 1.) Aplikativna raba za karakterizacijo novih spojin, predvsem za farmacevtske potrebe.
- 2.) Osnovne raziskave 14N NQR spektroskopije na organskih sistemih.

Čeprav je 14N NQR spektroskopija že precej staro področje, so mnogokatera osnovna vprašanja še vedno odprta. V preteklosti je bil glavni poudarek NQR raziskav namenjen samo resonančni frekvenci, kjer so raziskovalci skušali odgovoriti na vprašanja kot so: Kako je

rezonančna frekvenca povezana z kristalno zgradbo, oziroma kako jo lahko čimbolj natančno izračunamo na podlagi različnih modelov. Razlog za to so bili predvsem CW spektrometri, ki so natančno izmerili le frekvenco neke resonance, ne pa tudi ostalih parametrov. Današnji pulzni spektrometri omogočajo relativno enostavno merjenje tudi relaksacijskih parametrov, kot tudi natančne intenzitete resonance. Obe vrsti parametrov nam marsikaj povedo o vzorcu.

Predvsem gre tukaj izpostaviti naslednje probleme:

1.) Odvisnost intenzitete resonance z velikostjo/majhnostjo kristalnih delcev?

Tipičen 14N NQR vzorec je polikristaliničen prah, kjer je velikost posameznih delcev odvisna od načina priprave. Zelo pogosto je zaželeno, da ima učinkovina čim večjo površino, zato jo še posebej dobro zmeljejo (mikronizirajo), kar pa utegne vplivati na NQR parametre. Namreč, NQR resonanca je lastnost urejenega sistema, toda kristalni delec je na površini le delno urejen, saj nima sosedov. Zaradi tega pričakujemo, da resonančna frekvenca površinske plasti drugačna, morda tako zelo, da je ne zaznamo, in zato posledično zgubimo nekaj signala. Pri zelo drobnem prahu utegne površina imeti že tako velik vpliv, da utegnejo biti meritve zelo nezanesljive. Pri kateri velikosti delcev se to zgodi je trnutno še neznano, a zagotovo bo to pomemben predmet 14N NQR raziskav v prihodnosti.

2.) Tudi relaksacijski parametri so pri sedanjih analizah v veliki meri zanemarjeni. Tako kot pri intenziteti, pričakujemo da ima površina kristalov pomembno vlogo. Ne vemo pa, pri kakšni velikosti kristalov se to zgodi. Podobno velja tudi za vzorce izpostavljene tlakom in pri drugih metodah za pripravo vzorcev.

Odgovor na obe vprašanji lahko načeloma dobimo tudi brez našega avtomatiziranega spektrometra, a pričakovati je, da bo potrebno delati z velikim številom različnih vzorcev in snovmi za katere bo potrebno predhodno poiskati frekvenco. Naš, avtomatiziran spektrometer, bo pri tem delu v veliko pomoč, saj smo iskanje frekvenc avtomatizirali in precej pospešili. Zaradi tega se bomo lahko bistveno bolje postavili delu na drugih parametrih, kar nam bo nudilo znatno prednost pred drugimi konkurenčnimi skupinami v svetovnem merilu.

ANG

The 14N NQR spectrometer for automatic characterization of new substances was being developed with two uses in mind:

1.) The applied use for the characterization of new substances, especially for pharmaceutical needs.

2.) To help the basic research on organic systems with 14N NQR spectroscopy.

Although 14N NQR is an old spectroscopic technique, nowadays there are still many open questions. In the past, the 14N NQR research was mainly focused on the resonance frequency, where the typical questions were: How is the resonance frequency connected with the crystal structure, or how to calculate the frequency using various models and approximations. The reason for using only frequency was the experimental equipment (CW spectrometers), which allowed to easily determine the frequency but not other resonance parameters. Modern spectrometers (pulse spectrometers) allow to relatively easily determine also relaxation parameters and accurately determine intensity. Both type of parameters are related with the sample physical properties, and can therefore also aid the research if the relationships are well understood. There are two problems which seem particularly interesting and important:

1.) The relationship between resonance intensity and crystallite size?

A typical 14N NQR sample is polycrystalline, where the size of the crystallites depends on the method of material preparation. Very often, the goal is to have a large sample surface, which is obtained by fine grinding the sample. But this can/will influence also the NQR parameters. Namely, the NQR resonance is a property of the ordered region, but a small crystallite has a large surface area, which is only partially ordered, as the nuclei lack their neighbors. Because of these, we expect that the resonance of the surface region will be very broad, and may not be observed. Therefore some intensity will be lost. For very fine powders, this effect may be so large to reduce the reliability of the measurement significantly. So far, the crystallite size where surface effects become important is not known yet, but certainly this will be an important topic in the future.

2.) So far, the relaxation parameters are almost never used for analysis. We expect, that these parameters will be also significantly affected by the size of the crystallites, but we do not yet know at what size these effects will become important. A similar situation is true also when the sample is being exposed to pressure, and when some other techniques are used for sample

preparation.

In principle, the answers for the above questions, could be provided without the new spectrometer, but we foresee that many different samples and materials will be required to elucidate the behavior, every time finding the resonance frequency first. Our spectrometer for automatic characterization, will help us a lot, as the task of finding the frequency is now just a routine, and on top of that, much faster than before. Because of this, we will be able to spend much more time on the actual parameters under study and give us an important advantage over other competing groups.

9.2. Pomen za razvoj Slovenije¹⁰

SLO

14N NQR avtomatiziran spektrometer je samostojna naprava, saj za svoje delovanje ne potrebuje drugih pomožnih naprav. Zaradi tega je takoj uporabna, recimo kot analitska naprava v laboratorijih. Ocenjujemo, da ima velik tržni potencial. Načrtujemo, da bo ta naprava podlaga za novo nastalo spin-off podjetje, ki utegne najprej tržiti posamezne storitve analiziranja vzorcev na regionalnem področju, v kasnejši fazi pa tudi proizvajati in prodajati take spektrometre na svetovnem tržišču. Kot visokotehnološko podjetje utegne imeti veliko dodano vrednost, kar je vsekakor ugodno za Slovenijo in njen nadaljni razvoj. Napravo bomo tudi oglaševali na vseh pomembnejših konferencah s tega področja in tako promovirali Slovenijo in njeno tehnološko usposobljenost.

ANG

The 14N NQR spectrometer for automatic characterization of new substances is a standalone instrument, which does not need additional components for its operation. Because of this, it can be directly used as an analytical tool in various laboratories. We therefore foresee a huge marketing potential. The plan is to use this product as a basis for a new spin-off company which will first offer commercial 14N NQR analysis regionally, and later, sell the spectrometer worldwide. As a high-tech company, the planned added value will be high, which would be very beneficial for Slovenia and its further development. The product will be advertised on all important conferences in this field and thus promote Slovenia and its technological development.

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		
F.01	Pridobitev novih praktičnih znanj, informacij in veščin	
	Zastavljen cilj	☒ DA ☐ NE
	Rezultat	Dosežen ▼
	Uporaba rezultatov	V celoti ▼
F.02	Pridobitev novih znanstvenih spoznanj	
	Zastavljen cilj	☒ DA ☐ NE
	Rezultat	Dosežen ▼
	Uporaba rezultatov	V celoti ▼
F.03	Večja usposobljenost raziskovalno-razvojnega osebja	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☒ NE
	Rezultat	▼
	Uporaba rezultatov	▼
F.04	Dvig tehnološke ravni	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☒ NE

	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.05	Sposobnost za začetek novega tehnološkega razvoja	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☒ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.06	Razvoj novega izdelka	
	Zastavljen cilj	☒ DA ☐ NE
	Rezultat	Dosežen bo v naslednjih 3 letih
	Uporaba rezultatov	Uporabljen bo v naslednjih 3 letih
F.07	Izboljšanje obstoječega izdelka	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☒ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.08	Razvoj in izdelava prototipa	
	Zastavljen cilj	☒ DA ☐ NE
	Rezultat	Dosežen bo v naslednjih 3 letih
	Uporaba rezultatov	Uporabljen bo v naslednjih 3 letih
F.09	Razvoj novega tehnološkega procesa oz. tehnologije	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☒ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.10	Izboljšanje obstoječega tehnološkega procesa oz. tehnologije	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☒ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.11	Razvoj nove storitve	
	Zastavljen cilj	☒ DA ☐ NE
	Rezultat	Dosežen
	Uporaba rezultatov	V celoti
F.12	Izboljšanje obstoječe storitve	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☒ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.13	Razvoj novih proizvodnih metod in instrumentov oz. proizvodnih procesov	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☒ NE
	Rezultat	

	Uporaba rezultatov	
F.14	Izboljšanje obstoječih proizvodnih metod in instrumentov oz. proizvodnih procesov	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☒ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.15	Razvoj novega informacijskega sistema/podatkovnih baz	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☒ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.16	Izboljšanje obstoječega informacijskega sistema/podatkovnih baz	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☒ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.17	Prenos obstoječih tehnologij, znanj, metod in postopkov v prakso	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☒ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.18	Posredovanje novih znanj neposrednim uporabnikom (seminarji, forumi, konference)	
	Zastavljen cilj	☒ DA ☐ NE
	Rezultat	Dosežen
	Uporaba rezultatov	V celoti
F.19	Znanje, ki vodi k ustanovitvi novega podjetja ("spin off")	
	Zastavljen cilj	☒ DA ☐ NE
	Rezultat	Dosežen
	Uporaba rezultatov	Uporabljen bo v naslednjih 3 letih
F.20	Ustanovitev novega podjetja ("spin off")	
	Zastavljen cilj	☒ DA ☐ NE
	Rezultat	Ni dosežen
	Uporaba rezultatov	Uporabljen bo v naslednjih 3 letih
F.21	Razvoj novih zdravstvenih/diagnostičnih metod/postopkov	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☒ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.22	Izboljšanje obstoječih zdravstvenih/diagnostičnih metod/postopkov	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☒ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	

F.23	Razvoj novih sistemskih, normativnih, programskih in metodoloških rešitev	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☒ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.24	Izboljšanje obstoječih sistemskih, normativnih, programskih in metodoloških rešitev	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☒ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.25	Razvoj novih organizacijskih in upravljavskih rešitev	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☒ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.26	Izboljšanje obstoječih organizacijskih in upravljavskih rešitev	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☒ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.27	Prispevek k ohranjanju/varovanje naravne in kulturne dediščine	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☒ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.28	Priprava/organizacija razstave	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☒ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.29	Prispevek k razvoju nacionalne kulturne identitete	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☒ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.30	Strokovna ocena stanja	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☒ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.31	Razvoj standardov	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☒ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.32	Mednarodni patent	

	Zastavljen cilj	☒ DA ☐ NE
	Rezultat	Dosežen bo v naslednjih 3 letih ▼
	Uporaba rezultatov	Ni uporabljen ▼
F.33	Patent v Sloveniji	
	Zastavljen cilj	☒ DA ☐ NE
	Rezultat	Dosežen bo v naslednjih 3 letih ▼
	Uporaba rezultatov	Ni uporabljen ▼
F.34	Svetovalna dejavnost	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☒ NE
	Rezultat	▼
	Uporaba rezultatov	▼
F.35	Drugo	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☒ NE
	Rezultat	▼
	Uporaba rezultatov	▼

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	
G.01	Razvoj visokošolskega 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:		☐	☐	☐	☐	

Komentar

--

12.Pomen raziskovanja za sofinancerje¹¹

	Sofinancer		
1.	Naziv	Gorenje gospodinski aparati, d.d.	
	Naslov	Partizanska 12, 3503 Velenje, Slovenija	
	Vrednost sofinanciranja za celotno obdobje trajanja projekta je znašala:		89.819 EUR
	Odstotek od utemeljenih stroškov projekta:		25 %
	Najpomembnejši rezultati raziskovanja za sofinancerja		Šifra
	1.	Razvoj 14N NQR spektrometra za avtomatizirano karakaterizacijo novih spojin	F.06

		2.	Pridobitev novih spoznanj o NQR instrumentih	F.02
		3.		
		4.		
		5.		
		Komentar		
		Oцена		
		Projekt uspešno zaključen		

13. Izjemni dosežek v letu 2014¹²

13.1. Izjemni znanstveni dosežek

13.2. Izjemni družbeno-ekonomski dosežek

C. IZJAVE

Podpisani izjavljam/o, da:

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

Podpisi:

*zastopnik oz. pooblaščen oseba
raziskovalne organizacije:*

in

vodja raziskovalnega projekta:

Institut "Jožef Stefan"

Alan Gregorovič

ŽIG

Kraj in datum:

Ljubljana

10.3.2015

Oznaka poročila: ARRS-RPROJ-ZP-2015/151

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

² 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](#)

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

⁴ 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](#)

⁵ 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](#)

⁶ 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](#)

⁷ 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](#)

⁸ 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](#)

⁹ Največ 4.000 znakov, vključno s presledki [Nazaj](#)

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

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

¹² 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

73-73-D4-9E-A2-0C-2F-8E-6C-C5-F3-49-2C-7F-B1-36-16-4C-06-AE