

Záverečná karta projektu

Názov projektu Evidenčné číslo projektu **APVV-0059-10**

Interakcie v bio a nanosystémoch

Zodpovedný riešiteľ **Prof. RNDr. Vladimír Kellö, DrSc.**

Príjemca **Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta**

Názov pracoviska, na ktorom bol projekt riešený

1. Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta; Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie a Katedra anorganickej chémie
2. Univerzita Mateja Bela, Fakulta prírodných vied, Katedra chémie
3. Slovenská Technická Univerzita v Bratislave, Materiálovotechnologická fakulta so sídlom v Trnave, Ústav materiálov
- 4.
- 5.

Názov a štát zahraničného pracoviska, ktoré spolupracovalo pri riešení

1. Ústav organickej chémie a biochémie Av ČR. Praha, ČR
2. Univerzita vo Viedni, Fakulta fyziky, Viedeň, Rakúsko
3. Universite Lille, Lille, Francúzsko

Udelené patenty/podané patentové prihlášky, vynálezy alebo úžitkové vzory, ktoré sú výsledkami projektu

- 1.
- 2.
- 3.

Najvýznamnejšie publikácie (knihy, články, prednášky, správy a pod.) zhrňujúce výsledky projektu – uveďte aj publikácie prijaté do tlače

1. T. Bučko, S. Lebegue, J. Hafner, J. G. Angyan; Tkatchenko-Scheffler van der Waals correction method with and without self-consistent screening applied to solids, Phys. Rev. B 87, artn. 064110, (2013). SCI citácie - 31
2. R. Sedlák, T. Janowski, M. Pitoňák, J. Řezáč, P. Pulay, P. Hobza; Accuracy of quantum chemical methods for large noncovalent complexes, J. Chem. Theory Comput. 9, 3364-3374, (2013). SCI citácie - 16
3. L. F. Pašteka, T. Rajský, M. Urban; Toward understanding the bonding character in complexes of coinage metals with lone-pair ligands. CCSD(T) and DFT computations, J.

Phys. Chem. A 117, 4472-4485, (2013). SCI citácie - 7

4. L. F. Pašteka, M. Melicherčík, P. Neogrády, M. Urban; CASPT2 and CCSD(T) calculations of dipole moments and polarizabilities of acetone in excited states, Mol. Phys. 110, 2219-2237, (2012). SCcitácie - 5

5. P. Mach, Š. Budzák, M. Medved', O. Kysel'; Theoretical analysis of charge-transfer electronic spectra of methylated benzenes-TCNE complexes including solvent effects: approaching experiment, Theor. Chem. Accounts 131, artn. 1268, (2012). SCicitácie - 5

Uplatnenie výsledkov projektu

Ide o výsledky základného výskumu vlastností molekúl a ich interakcií potenciálne využiteľné najmä v materiálovej chémii, katalýze a vo vývoji liečiv.

CHARAKTERISTIKA VÝSLEDKOV

Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu v slovenskom jazyku (max. 20 riadkov)

Prispeli sme k ďalšiemu vývoju metód počítačovej chémie vhodných na výpočty interakčných energií presnými metódami kvantovej a relativistickej chémie ako aj DFT metód so zahrnutím disperzných interakcií, ktoré umožňujú výpočty postupne väčších molekulových komplexov s dostatočnou presnosťou. Hlavnou náplňou projektu boli aplikácie na interakcie v biosystémoch ako aj interakcie postupne vedúce k pochopeniu javov na nanoklastrovej úrovni. Podstatné sú aj výpočty v tuhej fáze, až po katalýzu. Vo vývoji DFT metód sme implementovali nové prístupy k zahrnutiu disperzných interakcií. Realizovali sme rad výpočtov, ktoré slúžia ako referenčné dáta pre menej presné ale široko aplikovateľné DFT metódy. Interpretovali sme dipólové momenty a polarizovateľnosti molekúl v excitovaných stavoch. Počítali sme rad komplexov s prenosom náboja a vplyv solventu na takéto komplexy, najmä komplexov, kde ako donor vystupovali tioamidy, používané, či navrhované ako budúce liečivá pri hypertyroizme. V oblasti tzv. in silico návrhu nových liečiv sme testovali sadu aproximácií a empirických korekcií k semiempirickej metóde PM6, pomocou ktorej bolo získané "skóre" série inhibitorov Auróra A kinázy. K pochopeniu procesov interakcie ligandov s nanoklastromi kovov sme prispeli prácou o väzbovom charaktere v sérii komplexov mincový kov - lone pair ligand, s dôrazom na nanoklastre zlata. V klastroch atómov berýlia sme analyzovali neaditivitu interakčných energií a ukázali sme kľúčový význam troj až šesťčasticových efektov v týchto klastroch. Navrhli sme model „confinmentu“ pre určenie polarizovateľností aniónov v iónových kryštáloch.

Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu v anglickom jazyku (max. 20 riadkov)

We have contributed to the further development of computational chemistry methods suitable for the calculations of interaction energies using both high-level quantum and relativistic methods and DFT approaches including dispersion. These developments gradually pave the road to the calculations of larger molecular complexes with acceptable accuracy. Our main goals were applications to interactions in bio systems, as well as to the understanding of the nano-scale phenomena in clusters. Important were also the solid-state calculations aiming at catalysis applications. We have implemented new approaches in DFT leading to the inclusion of dispersion interactions. Results of our computations will serve as benchmark data for approximate but widely applicable DFT methods. Dipole moments and polarizabilities for excited states were interpreted. We calculated a series of CT complexes (including solvent effect); especially the complexes including thioamides as donors, these are considered as future medicaments of hyperthyroism. We have tested various approximations and empirical corrections in PM6 method to be used for design in silico studies. Using this method we predicted the score of Aurora A-kinase inhibitors. In the papers on bonding in the series of complexes coinage-metal...ligand we contributed to the understanding of the interactions metal nanoclusters – ligand emphasizing Au nanoclusters. The non-additivities in the interactions of Be clusters were analyzed, here we have stressed the key role of three- to six-

body effects. We have proposed a model of the confinement for the calculations of polarizabilities in ionic crystals.

Svojím podpisom potvrdzujem, že údaje uvedené v záverečnej karte sú pravdivé a úplné a súhlasím s ich zverejnením.

Zodpovedný riešiteľ

Prof. RNDr. Vladimír Kellö, DrSc.

V Bratislave 25. 11. 2014

Štatutárny zástupca príjemcu

Prof. RNDr. Karol Mičieta, PhD.

V Bratislave 25. 11. 2014

.....
podpis zodpovedného riešiteľa

.....
podpis štatutárneho zástupcu príjemcu