



Záverečná karta projektu

Názov projektu

Evidenčné číslo projektu **APVV –0483–10**

Relativistické výpočty parametrov NMR a EPR spektroskopie pre zlúčeniny obsahujúce ťažké prvky: pokračovanie metodologického vývoja a aplikácie

Zodpovedný riešiteľ **Dr. Vladimír Malkin, DrSc.**

Príjemca **Ústav anorganickej chémie SAV**

Názov pracoviska, na ktorom bol projekt riešený

1. Ústav anorganickej chémie SAV
- 2.
- 3.
- 4.
- 5.

Názov a štát zahraničného pracoviska, ktoré spolupracovalo pri riešení

- 1.
- 2.
- 3.

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. M. Hrda, T. Kulich, M. Repisky, J. Noga, O. L. Malkina, V. G. Malkin, „Implementation of the Diagonalization-Free Algorithm in the Self-Consistent Field Procedure within the Four-Component Relativistic Scheme“, JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY 2014 (35) 1725-1737.
2. M. Hricovini, P-A. Driguez, O. L. Malkina, „NMR and DFT Analysis of Trisaccharide from Heparin Repeating Sequence“, JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B 2014(118) 11931-11942
3. .S. Komorovský, M. Repiský, K. Ruud, O.L. Malkina, V.G. Malkin: Four-Component Relativistic Density Functional Theory Calculations of NMR Shielding Tensors for

Paramagnetic Systems. J. Phys. Chem. A 117,(2013) 14209–14219..

4. P. Hrobarik, V. Hroarikova, A. H. Greif, M. Kaupp, Giant Spin-Orbit Effects on NMR Shifts in Diamagnetic Actinide Complexes: Guiding the Search of Uranium(VI) Hydride Complexes in the Correct Spectral Range, Angew. Chem. Int. Ed. , 51 (2012) 10884 –10888

5.

Uplatnenie výsledkov projektu

Metódy a programy vyvíjané v rámci riešenia projektu umožňujú predpovedať, analyzovať a vysvetliť NMR a EPR spektrá systémov obsahujúcich ťažký prvok a sú použiteľné vo všetkých oblastiach chémie ťažkých prvkov, biochémii a materiálovom výskume, od syntézy nových zlúčenín a farmaceutík až po problémy spracovania nukleárneho odpadu.

CHARAKTERISTIKA VÝSLEDKOV

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

Program ReSpect na relativistické výpočty NMR a EPR parametrov, ktorý bol ďalej vyvíjaný v rámci projektu, teraz možno predpovedať NMR a EPR parametre pre stredne veľké systémy (okolo 100 atómov) presnejšie a oveľa rýchlejšie než bolo možné doteraz. Ciele projektu boli splnené

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

The program ReSpect for relativistic calculations of NMR and EPR parameters, which was further developed in the framework of the project, now allows one to predict NMR and EPR parameters for systems of moderate size (around 100 atoms) more accurately and much faster than was possible before. The goals of the project were fulfilled.

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

Zodpovedný riešiteľ

Dr. Vladimír Malkin, DrSc.

V Bratislave 28. 11. 2014

Štatutárny zástupca príjemcu

doc. Ing. Miroslav Boča, PhD.

V Bratislave 28. 11. 2014

.....
podpis zodpovedného riešiteľa

.....
podpis štatutárneho zástupcu príjemcu