



Záverečná karta projektu

Názov projektu

Evidenčné číslo projektu

APVV-0510-12

Nové prístupy pre riešenie systémov s vysokým stupňom nedynamickej elektrónovej korelácie v rámci teórie spriahnutých klastrov

Zodpovedný riešiteľ **prof. RNDr. Jozef Noga, DrSc.**

Príjemca

Univerzita Komenského v Bratislave

Šafárikovo námestie 6,818 06 Bratislava

IČO: 00397865

DIČ: 2020845332

Názov pracoviska, na ktorom bol projekt riešený

1. Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta
- 2.
- 3.
- 4.
- 5.

Názov a štát zahraničného pracoviska, ktoré spolupracovalo pri riešení

1. Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, Praha, Česká republika
2. Kobe University, Kobe, Japonsko
- 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 Procedures within the Four-Component Relativistic Schemes in the ReSpect Code, J. Comput. Chem. 35, 1725-1737 (2014)
2. M. Repisky, L. Konecny, M. Kadek, S. Komorovsky, O. L. Malkina, V. G. Malkin, and K. Ruud: Excitation energies from real-time propagation of the four-component Dirac-Kohn-

Sham Equation, Journal of Chemical Theory and Computation, 11, 980-991, 2015

3. G. Oreškova, L. Krivosudsky, J. Simunek, J. Noga: Structural and spectral properties of tartrato complexes of vanadium(V) from quantum chemical calculations, Theor. Chem. Acc. 134, 116-126, 2015

4. Lang, J.; Švaňa, M.; Demel, O.; Brabec, J.; Kedžuch, S.; Noga, J.; Kowalski, K.; Pittner, J.: A MRCC study of the isomerisation of cyclopropane, Molecular Physics, DOI: 10.1080/00268976.2017.1317112 (2017)

5. Malkin, VG.; Malkina, OL.; Zhidomirov, GM.: Visualization of Electron Paramagnetic Resonance Hyperfine Structure Coupling Pathways, JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A, 121, 3580-3587, 2017

Uplatnenie výsledkov projektu

Výsledky projektu základného výskumu predstavujú prínos v oblasti poznania a ich súčasná implementácia významne posúva hranice aplikovateľnosti vyvinutých teoretických prístupov do oblasti chemicky zaujímavých molekulových systémov.

CHARAKTERISTIKA VÝSLEDKOV

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

V priebehu riešenia projektu sa vyvinuli alternatívne prístupy pre výpočty energií a vlastností molekúl, tak aby sa zvýšila schopnosť efektívne popísať systémy s vysokým stupňom nedynamickkej elektrónovej korelácie. Cieľom bolo tiež dosiahnuť čo najnižšiu úroveň škálovania výpočtovej náročnosti s rastúcou veľkosťou systému. Nové metódy zahŕňajú multireferenčné prístupy v rámci explicitne korelovannej teórie spriahnutých klastrov, explicitne korelovanú teóriu spriahnutých klastrov s excitáciami s dvojnásobne obsadených orbitalov, a tiež metódy na báze teórie funkcionálu hustoty so zahrnutím relativistických efektov v rámci štvor-komponentnej schémy. Cieľovo boli orientované na výpočty excitačných energií, parametre EPR spektier vrátane praktickej vizualizácie g-tenzorovej hustoty, a možnosti vizualizácie ciest aštruktúry hyperjemného spriahnutia v týchto spektrách. Tieto prístupy pomohli pri objasňovaní konštant C-C spin-spinových interakcií sprostredkovaných cez "ťažké" atómy. Teoretické výpočty boli tiež využité pre interpretáciu spektier elektrónového aj vibračného cirkulárneho dichroizmu, ako aj samotných vibračných spektier stereoizomérov komplexov vanádu(V) so Schiffovými bázami.

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

In the course of this project, alternative approaches to calculations of molecular energies and properties have been developed that have contributed to effective description of systems with high degree of non-dynamical electron correlation. At the same time, those have been aimed to achieve possibly low computational scaling with the size of the system. Novel approaches include multi-reference methods within the explicitly correlated coupled cluster theory, explicitly correlated doubly occupied pairs coupled cluster theory but also method based on the density functional theory treating relativistic effects within the four-component scheme. All these have been aimed toward computations of excitation energies, parameters of EPR spectra including practical visualization of the g-tensor densities or a possibility to visualize the EPR hyperfine structure coupling pathways. Aforementioned approaches have been successfully used for elucidation of the C-C spin-spin coupling constants related to paths over heavy atoms. Theoretical calculations have been used in interpretation of both electronic and vibrational circular dichroism, as well as pure vibrational (IR/Raman) spectra of stereoisomers of vanadium(V) complexes with Schiff bases.

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

Zodpovedný riešiteľ

prof. RNDr. Jozef Noga, DrSc.

V Bratislave 27. 09. 2017

Štatutárny zástupca príjemcu

prof. RNDr. Karol Mičieta, PhD

V Bratislave 27. 09. 2017

.....
podpis zodpovedného riešiteľa

.....
podpis štatutárneho zástupcu príjemcu