

Formulár ZK - Záverečná karta projektu

Riešiteľ: Dr. Vladimír Malkin, DrSc.	Evidenčné číslo projektu: APVV-0625-06
Názov projektu: K lepšej presnosti v relativistických výpočtoch elektrónovej štruktúry a magneto-rezonančného spektra zlúčenín obsahujúcich ťažké prvky	

Na ktorých pracoviskách bol projekt riešený:	Ústav Anorganickej Chémie, SAV
Ktoré zahraničné pracoviská spolupracovali pri riešení (názov, štát):	Julius-Maximilians-Universität Würzburg, Nemecko

Udelené patenty alebo podané patentové prihlášky, vynálezy alebo úžitkové vzory vychádzajúce z výsledkov projektu:	
Publikácie (knihy, články, prednášky, správy a pod.) zhrňujúce výsledky projektu (uvedte i publikácie prijaté do tlače): <i>Uvádzajte maximálne päť najvýznamnejších publikácií.</i>	S. Komorovský, M. Repiský, O. L. Malkina, V. G. Malkin, I. Malkin Ondik, M. Kaupp, "A fully relativistic method for calculation of nuclear magnetic shielding tensors with a restricted magnetically balanced basis in the framework of the matrix Dirac-Kohn-Sham equation", J. Chem. Phys. 128 , 104101 (2008).
	Repiský M., Komorovský S., Malkina O., Malkin V.: Restricted magnetically balanced basis applied for relativistic calculations of indirect nuclear spin-spin coupling tensors in the matrix Dirac-Kohn-Sham framework. Chemical Physics, 2009, vol. 356, p. 236-242
	Kemper S., Hrobárik P., Kaupp M., Schlörer N.E.: Jacobsen's catalyst for hydrolytic kinetic resolution: Structure elucidation of paramagnetic Co(III) salen complexes in solution via combined NMR and quantum chemical studies. J. Amer. Chem. Soc. 2009, vol. 131, p. 4172-4173
V čom vidíte uplatnenie výsledkov projektu:	Boli navrhnuté, implementované, a aplikované nové štvor-komponentné relativistické prístupy pre kvantovo-chemické výpočty NMR/EPR parametrov pre systémy obsahujúce ťažké prvky. Tieto metódy dovoľujú získať viac informácií o štruktúre študovaných zlúčenín z experimentálnych spektier.

Charakteristika výsledkov

Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu (max. 20 riadkov) - slovensky:

Vyvinuli a efektívne sme implementovali štvor-komponentné DFT metódy určené na výpočet parametrov magnetickej rezonancie zlúčenín obsahujúcich ťažké prvky. Vôbec po prvý krát boli vyvinuté a naprogramované metódy na výpočet NMR parametrov, ktoré sú založené na myšlienke magneticky vyváženej bázy pre malú komponentu. Špeciálne sme sa zamerali na efektivitu a presnosť vyvíjaného programu. Vďaka tomu náš nový štvor-komponentný modul kvantovo-chemického balíka ReSpect súperí v efektivite s najvyspelejšími štvor-komponentnými DFT programami. Štvor-komponentný blok ReSpect-u určený na výpočet magnetických vlastností pomocou nekolineárnych funkcionálov spinovej hustoty obsahuje: NMR tienenie, nepriame spin-spinové spriahnutie, hyperjemnú štruktúru a g-tenzor. Dosiahnutá efektivita, spoľahlivosť a funkčnosť ReSpect-u nám umožnila začať aplikácie na chemicky zaujímavých štruktúrach. Začali sme štúdiou elektronového g-tenzora [MoO(bdt)₂] a [WO(bdt)₂] (bdt = benzene-1,2-dithiolate) komplexov na štvor-komponentnej úrovni. Okrem toho sme uskutočnili štúdiu paramagnetických salénových komplexov Co(III). Náš kód sme postúpili aj naším zahraničným partnerom v Nemecku (Univerzita vo Wuerzburgu) a Nórsku (Univerzita v Tromso).

Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu (max. 20 riadkov) - anglicky:

Relativistic four-component DFT based methods for calculation of magnetic resonance parameters in heavy element compounds have been developed and implemented. In particular, for the first time, methods for calculations of NMR parameters based on the concept of a magnetically balanced basis for the small component have been developed and programmed. Special attention has been paid to the computational efficiency and accuracy of the program. The four-component module of the quantum-chemical package ReSpect is now competitive with most advanced four-component DFT programs in effectiveness. The four-component property block of ReSpect includes the calculation of NMR shielding tensors, indirect nuclear spin-spin coupling tensors, hyperfine structure tensors and g-tensors using non-collinear spin-density functionals. The achieved efficiency, reliability and functionality of ReSpect made it possible to start applications to chemically interesting structures. Thus, the electronic g-tensors of [MoO(bdt)₂] and [WO(bdt)₂] (bdt = benzene-1,2-dithiolate) complexes were investigated at the four-component level. Besides, a study of paramagnetic Co(III) salen complexes in solution was performed. Our code has been transferred to our foreign partners in Germany (University of Wuerzburg) and Norway (University of Tromso).

Podpisom záverečnej karty riešiteľ vyjadruje svoj súhlas so zverejnením údajov v nej uvedených.

Podpis zodp. riešiteľa:

Dátum:

Podpis štatutárneho zástupcu:

Pečiatka: