

Záverečná karta projektu

Názov projektu Evidenčné číslo projektu **APVV-15-0105**

Nekovalentné interakcie v systémoch s rastúcou zložitou

Zodpovedný riešiteľ **doc. Mgr. Michal Pitoňák, PhD.**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
2. Univerzita Mateja Bela, Fakulta prírodných vied, Katedra chémie
3. Slovenská Technická Univerzita v Bratislave, Materiálovotechnologická fakulta so sídlom v Trnave, Ústav materiálov

Názov a štát zahraničného pracoviska, ktoré spolupracovalo pri riešení

Université de Lille, CNRS, UMR 8522 - PC2A - PhysicoChimie des Processus de Combustion et de l'Atmosphère, 59000 Lille, France
IFP Energies nouvelles Rond-Point de l'échangeur de Solaize, BP3, 69360 Solaize, France
Experimental Physics Department, CERN, 1211 Geneva, Switzerland
Ústav fyzikální chemie, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6 – Dejvice

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

Vzhľadom na skutočnosť, že ide o projekt základného výskumu patenty, vynálezy alebo úžitkové vzory neboli plánované.

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

Výsledkom riešenia projektu je 77 pôvodných prác publikovaných v medzinárodných vedeckých časopisoch indexovaných WOS. Tieto práce získali dosiaľ 256 WOS citácií (bez autocitácií). Tu je výber 7 reprezentatívnych prác publikovaných v Q1 časopisoch s impaktom 5.0 až 14.6.

1. T. Gould, T. Bučko; J. Chem. Theory Comput. 12, 3603, (2016), 29 citácií
2. T. Gould, S. Lebegue, J.G. Angyan, T. Bučko; J. Chem. Theory Comput. 12, 5920, (2016), 31 citácií
3. W.E. Taifan, T. Bučko, J. Baltrusaitis; J. Catal. 346, 78, (2017), 28 citácií
4. L.F. Pašteka, Y.L. Hao, A. Borschevsky, V.V. Flambaum, P. Schwerdtfeger; Phys. Rev. Lett. 122, 160801, (2019), 3 citácie
5. M.W.H. Hoorens, M. Medved', A.D. Laurent, M. Di Donato, S. Fanetti, L. Slappendel, M. Hilbers, B. Feringa, W.J. Buma, W. Szymanski, Nature Commun. 10, 2390, (2019), 5 citácií
6. H. D. Patel, T. H. Tran, C. J. Sumbly, L. F. Pašteka, T. Fallon; J. Am. Chem. Soc. 142, 3680, (2020), 1 citácia
7. J. Rey, C. Bignaud, P. Raybaud, T. Bučko, C. Chizallet; Angew. Chem. Int. Ed. 59, 18938, (2020)

Uplatnenie výsledkov projektu

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

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

Projekt zastrešoval viacero cieľov, realizovaných viacerými výskumnými skupinami, ktorých spoločným menovateľom však bol jeden: vplyv nekovalentných interakcií a ich presný popis metódami kvantovej chémie. Súvisiace čiastkové problémy adresované jednotlivými výskumnými skupinami (na základe ich špecifickej expertízy) vyústili do širokého spektra publikácií v zahraničných karentovaných časopisoch, pričom ich celkový počet (78) prekročil pôvodný plán o 160%. O ich kvalite napovedá takmer 300 citácií (oproti plánovaným 70) evidovaných počas riešenia projektu. Z príspevku k vývoju metód na presný popis nekovalentných interakcií, či už z hľadiska zahrnutia disperzných interakcií, viacčasticových efektov (neaditivít), relativistických efektov, termálnych alebo solvatačných efektov, môžeme vyzdvihnúť práce T. Bučka (UK BA) o vývoji metód zahrnutia disperznej energie vo výpočtoch tuhej fázy (metódy MBD a MBD/FI implementované v programe VASP), M. Pitoňáka (UK BA) a M. Melicherčika (UMB BB) o rozvoji metód mriežky bázových funkcií atómových orbitálov, znižujúcich náročnosť výpočtov interakčnej energie, vypracovanie protokolu na zahrnutie nekovalentných interakcií do výpočtu nelineárnych optických vlastností solvatovaných systémov (M. Medved' – UMB BB), alebo implementáciu efektívnych paralelných algoritmov do relativistického programového balíka DIRAC (M. Iliáš – UMB BB). Metodický vývoj bol úspešne pretavený do aplikačných štúdií, v ktorých dominovali vysoko relevantné témy ako adsorpcia (jódových zlúčením, Cs) a katalýza (záchyt CO₂, konverzia 1,3-butadiénu, karbonylácia metanolu, izomerizácie olefínov) na tuhej fáze (zeolity, borofén, Al, Mo, CeO₂), nelineárne optické vlastnosti (p-nitroanilín, uracil) a vplyv vibračných efektov (dimér HCN v rôznych rozpúšťadlách, komplexy HCN s malými molekulami obsahujúcimi halogén) alebo relativistické štúdie ťažkých kovov (nové materiály na báze mincových kovov a organických substituentov, magnetické momenty dôležité pre NMR spektroskopiu, excitované stavy, laserové chladenie).

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

Project covered several goals, carried out by multiple research groups, yet with a common central motive: the impact of noncovalent interactions and the possibility to describe them accurately using the state-of-the-art quantum chemistry computational methods. The resulting subtasks investigated by each research group (based on their individual expertise), lead to number of high-quality publications (78) that exceeded the plan by 160%, with their quality justifiable by more 300 citations (70 planned) during the time span of the project. Among contributions to the methods development, be it accurate calculation of dispersion interactions; many-body effects (i.e. nonadditivities); relativistic effects; thermal or solvent effects, several achievements are worth being highlighted: work of T. Bučko (UK BA) on dispersion interaction inclusion into solid state calculations (MBD and MBD/FI methods implemented in VASP program package); work of M. Pitoňák (UK BA) and M. Melicherčík (UMB BB) on the off-center grids of atomic orbital basis functions, with promise of computational efficiency increase in noncovalent interaction calculations; elaboration of computational protocol for noncovalent interactions inclusion in nonlinear optical properties investigations of solvated systems by M. Medved' (UMB BB) or implementation of efficient parallel algorithms in the relativistic quantum chemistry program package DIRAC by M. Iliáš (UMB BB). Advances in novel methods and methodologies development were successfully transferred into applications dominated by highly relevant subjects such as adsorption (iodine species, Cs), catalysis (CO₂ capture, 1,3-butadiene conversion, methanol carbonylation, olefines isomerization) on the solid state (zeolites, borophene, Al, Mo, CeO₂), nonlinear optical properties (p-nitroaniline, uracil), vibrational effects (HCN dimer in solvents, HCN complexes with small, halogen-containing molecules) or relativistic studies of heavy elements (novel materials based on coin metals and organic substituents, magnetic moments for NMR spectroscopy, excited states, laser cooling).