

Záverečná karta projektu

Názov projektu Evidenčné číslo projektu **APVV-15-0726****Vývoj nových teoretických nástrojov pre predikciu a interpretáciu EPR a NMR parametrov**Zodpovedný riešiteľ **Dr. Vladimír Malkin, DrSc.**Príjemca **Ústav anorganickej chémie SAV**

Názov pracoviska, na ktorom bol projekt riešený

Ústav anorganickej chémie SAV

Názov a štát zahraničného pracoviska, ktoré spolupracovalo pri riešení

Hylleraas Centre for Quantum Molecular Sciences, Department of Chemistry, UiT The Arctic University of Norway,
N-9037 Tromsø, Norsko

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

Žiadne. Projekt patrí do základného výskumu.

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

1. J. Vicha, J. Novotny, S. Komorovsky, et al., "Relativistic Heavy-Neighbor-Atom Effects on NMR Shifts: Concepts and Trends Across the Periodic Table", CHEMICAL REVIEWS 120, 2020, 7065-7110 (IF = 52.76).
2. L. Konecny, M. Kadek, S. Komorovsky, O. L. Malkina, K. Ruud, and M. Repisky, "Acceleration of Relativistic Electron Dynamics by Means of X2C Transformation: Application to the Calculation of Nonlinear Optical Properties", J. Chem. Theory Comput. 2016, 12, 5823-5833, (IF = 5.245)
3. B. A. Chalmers, Ph. S. Nejman, A. V. Llewellyn, A. M. Felaar, B. L. Griffiths, E. I. Portman, E.-J. L. Gordon, K. J. H. Fan, J. D. Woollins, M. Bühl, O. L. Malkina, D. B. Cordes, A. M. Z. Slawin, P. Kilian "A study of through-space and through-bond J_{pp} coupling in a rigid nonsymmetrical bis(phosphine) and its metal complexes", Inorg. Chem. 57, 3387-3398 (2018). (IF=4.85)
4. M. Dračinský, M. Buchta, M. Buděšínský, J. Vacek-Chocholoušová, O. L. Malkina, I. Stará and I. Starý, "Dihydrogen contacts observed by through-space indirect NMR coupling", Chem. Sci. 9 (2018), A Chem. Sci., 2018,9, 7437-7446 (IF=9.956)
5. L. Jeremias, J. Novotný, M. Repisky, S. Komorovsky, R. Marek "Interplay of through-bond hyperfine and substituent effects on the NMR chemical shifts in Ru(III) complexes", Inorg. Chem. 57, 8748-8759 (2018). (IF=4.85)
6. J. Vicha, S. Komorovsky, M. Repisky, R. Marek, M. Straka "Relativistic spin-orbit heavy atom on the light atom NMR chemical shifts: General trends across the Periodic Table

explained”, J. Chem. Theory Comput. 14, 3025(2018).(IF=5.313)

Uplatnenie výsledkov projektu

Výsledky projektu môžu byť použité v mnohých oblastiach chémie ťažkých prvkov vrátane návrhu nových materiálov, spracovania jadrového odpadu, štúdiá bio- a medicínsky relevantných zlúčenín.

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

Hlavným výstupom projektu je zdokonalenie kvantovo-chemických metód predikcie a interpretácie spektroskopických parametrov, ktoré vedie k novému, pokročilejšiemu ako doteraz, teoretickému „nástroju“ na predikciu a interpretáciu NMR a EPR spektier. Zodpovedajúci nový teoretický vývoj bol implementovaný do relativistického kvantovo-chemického programu ReSpect. Vďaka svojej jedinečnej funkčnosti sa program v súčasnosti používa v mnohých výskumných skupinách po celom svete. Novo implementované funkcie programu ReSpect boli použité v mnohých praktických aplikáciách. Okrem toho sa riešili problémy správneho porovnania experimentálnych a teoretických výsledkov pre parametre NMR a EPR. Ciele projektu boli splnené.

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

The main outcome of the project is the improvement of quantum-chemical methods for prediction and interpretation of spectroscopic parameters leading to new, more advanced than before, theoretical “machinery” for prediction and interpretation of NMR and EPR spectra. The corresponding new theoretical developments were implemented into the relativistic density-functional program ReSpect. Due to its unique functionality the program is now used in many research groups all over the world. The newly implemented features of ReSpect were used in a number of practical applications. Besides, issues of the correct comparison of experimental and theoretical results for NMR and EPR parameters were addressed. The goals of the project were achieved.