

Formulár ZK - Záverečná karta projektu

Riešiteľ: Prof. RNDr. Miroslav Urban, DrSc.	Evidenčné číslo projektu: APVV-20-018405
Názov projektu: Vlastnosti molekúl s komplikovanou elektrónovou štruktúrou: Sofistikované výpočty a predpovede spektroskopických a elektrických vlastností	

Na ktorých pracoviskách bol projekt riešený:	Univerzita Komenského, Prírodovedecká fakulta
	Slovenská akadémia vied, Ústav anorganickej chémie
	Žilinská univerzita, Fakulta riadenia a informatiky
Ktoré zahraničné pracoviská spolupracovali pri riešení (názov, štát):	Ústav organickej chémie a biochémie AV ČR, Praha, ČR
	Lab. Chimie Quantique, Universite Louis Pasteur, Strasbourg, Francúzsko
	Dept. Quantum Chemistry, Nicolaus Copernicus University, Toruń, Poľsko
	Theoretical and Physical Chemistry Institute, the National Hellenic Research Foundation, Athens, Greece a iné

Udelené patenty alebo podané patentové prihlášky, vynálezy alebo úžitkové vzory vychádzajúce z výsledkov projektu:	
Publikácie (knihy, články, prednášky, správy a pod.) zhrňujúce výsledky projektu (uved'te i publikácie prijaté do tlače): <i>Uvádzajte maximálne päť najvýznamnejších publikácií.</i>	M. Iliaš, T. Saue; An infinite-order two-component relativistic Hamiltonian by a simple one-step transformation. J. Chem. Phys. 126 art.no. 064102-9 (2007).
	J. Noga, S. Kedžuch, J. Šimunek, S. Ten-no; Explicitly correlated coupled cluster F12 theory with single and double excitations. J. Chem. Phys. 128 , art.no. 174103-9 (2008).
	P. Dediková, M. Pitoňák, P. Neogrády, I. Černušák, M. Urban; Toward more efficient CCSD(T) calculations of intermolecular interactions in model hydrogen-bonded and stacked dimers. J. Phys. Chem. A 112 , 7115-7123 (2008).
	J. Páleníková, M. Kraus, P. Neogrády, V. Kellö, M. Urban; Theoretical study of molecular properties of low-lying electronic excited states of H ₂ O and H ₂ S. Mol. Phys. 106 , 2333-2344 (2008).
	M. Pitoňák, T. Janowski, P. Neogrády, P. Pulay, P. Hobza; Convergence of the CCSD(T) correction term for the stacked complex methyl adenine-methyl thymine: Comparison with lower-cost alternatives. J. Chem. Theory Comput. 5 , 1761-66 (2009)
V čom vidíte uplatnenie výsledkov projektu:	Umožňuje presné výpočty vlastností väčších molekúl než tomu bolo doteraz.

Charakteristika výsledkov

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

Vyvinuli a implementovali sme nové verzie Coupled Cluster metód. Možnosť uskutočniť nerelativistické a skalárne relativistické výpočty s väčšími bázami než doteraz, až po presnosť blížiacu sa limite bázy a rozšírenie ich použiteľnosti na výpočty väčších molekúl sme dosiahli a) Vývojom metódy OVOS, jej implementáciou pre open-shell systémy, zavedením Choleski dekompozície a paralelizáciou;

b) Zavedením alternatívnych korelačných faktorov a zovšeobecnením metód s explicitne korelovanou vlnovou funkciou aj na multireferenčné prípady; c) Implementovali sme inovatívnu metódu pre dvojkomponentné zahrnutie relativistických efektov do nekončeného poriadku (IOTC). Nová metóda umožňuje efektívnejšie zahrnutie spin-orbitálnych efektov. Metódy znamenajú ďalší krok k predpovediam vlastností molekúl s kontrolovanou presnosťou v zmysle idey „good results for a good reason“, v súlade s cieľmi projektu.

Aplikácie reprezentujú široké spektrum presných výpočtov vlastností molekúl v základnom aj v excitovaných stavoch. Príkladom sú veľmi presné potenciálové hyperplochy molekúl a molekulových komplexov astrofyzikálneho významu. Študovali sme trendy vo valenčne izoelektrónových molekulách. Značná časť práce sa týkala medzimolekulových interakcií, napr. pochopeniu trendov v stabilite komplexov Cu, Ag, Au s ligandami s rôznymi ionizačnými potenciálmi. Komplexy sú významné pre pochopenie mechanizmov tvorby SABs (Self Assembled Monolayers). K pochopeniu trendov prispela analýza relativistických efektov. Mimoriadne výsledky sme dosiahli pri výpočtoch vlastností biomolekúl (elektrónová afinita uracilu) a ich interakcií, ktoré sú benchmark hodnotami pre menej sofistikované metódy kvantovej chémie.

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

Within the project we have developed and implemented new versions of Coupled Cluster methods. Our achievements allow more accurate predictions of molecular properties than it was possible before, with larger basis sets allowing thus results for small molecules approaching the complete basis set limits. At the same time our methods allow calculations of still larger molecules. Main improvements include a) Development of the OVOS (Optimized Virtual Space Orbitals) method, its implementation for open-shell systems, utilizing the Choleski decomposition and parallelization; b) We have introduced alternative correlation factors in the explicitly correlated CCSD(T) method and generalized this method to multireference solutions; c) We have implemented a new method for treating two-component relativistic effects to the infinite order (IOTC). The new method allows considering spin-orbit effects in a very efficient manner. New methods represent a step toward predictions of molecular properties with increasing accuracy and allow predictions of properties for still larger molecules with high and controlled accuracy in the spirit of the idea of obtaining „good results for a good reason“. This corresponds to goals of the project.

Numerous applications represent a wide spectrum of accurate calculations of molecular properties in the ground and low-lying excited states. One example is calculation of hypersurfaces of molecules and their complexes needed for interpretations of some astrophysical problems. We have studied trends in properties of molecules with valence isoelectronic structure. Attention was paid to intermolecular interactions. For example we studied trends in stabilities of Cu, Ag, Ag with different ligands in relation to their ionization potentials. Understanding of trends was achieved by considering relativistic effects in heavy metal elements. Excellent results were obtained in calculations of properties of biomolecules (electron affinity of uracil) and their interactions. Our results serve as benchmarks for quantum chemistry methods.

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

Podpis zodp. riešiteľa:

Dátum: 27.11.2009

Podpis štatutárneho zástupcu:

Pečiatka: