



Záverečná karta projektu

Názov projektu

Evidenčné číslo projektu

LPP-0326-09

Relativistické výpočty NMR a EPR parametrov: od čísiel k pochopeniu podstaty

Zodpovedný riešiteľ **Dr. Oľga Malkin DrSc.**

Príjemca **Ústav anorganickej chémie SAV**

Názov pracoviska, na ktorom bol projekt riešený

1. Ústav anorganickej chémie SAV
- 2.
- 3.
- 4.
- 5.

Názov a štát zahraničného pracoviska, ktoré spolupracovalo pri riešení

- 1.
- 2.
- 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. A. Křístková, J. R. Asher, O. L. Malkina, V. G. Malkin, Vladimír, "Indirect nuclear ^{15}N - ^{15}N scalar coupling through a hydrogen bond: dependence on structural parameters studied by quantum chemistry tools", J. Phys. Chem. A, 2013, DOI: 10.1021/jp404650b.
2. M. Bühl, F. R. Knight, A. Křístková, I. Malkin-Ondík, O. L. Malkina, R. A. M. Randall, A. M. Z. Slawin, J.D. Woollins: Weak Te,Te Interactions through the Looking Glass of NMR Spin-Spin Coupling. In Angew. Chem. Int. Ed. 52 (2013) 2495–2498.
3. O. L. Malkina, A. Křístková, E. Malkin, S. Komorovský, V. G. Malkin, "Illumination of the effect of the overlap of lone-pairs on indirect nuclear spin-spin coupling constants", Phys. Chem. Chem. Phys. 13 (2011) 16015-16021.
4. E. Malkin, M. Repiský, S.Komorovský, P. Mach, O.L. Malkina, V.G. Malkin, "Effects of finite

size nuclei in relativistic four-component calculations of hyperfine structure”, J. Chem. Phys. 134, 044111 (2011).

5. R. Marek, A. Křístková, K. Maliňáková, J. Toušek, J. Marek, M. Hocek, . O.L. Malkina, V.G. Malkin, “ Interpretation of indirect nuclear spin-spin couplings in isomers of adenine: Novel approach to analyze coupling electron deformation density using localized molecular orbitals”, J. Phys. Chem. A 114 (2010) 6689-6700.

Uplatnenie výsledkov projektu

Nové vyvinuté výpočtové a interpretačné nástroje umožňujú štúdium NMR a EPR parametroch v zlúčeninách obsahujúcich ťažké prvky

CHARAKTERISTIKA VÝSLEDKOV

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

Bola vyvinutá nová efektívna metóda pre výpočty relativistických NMR spin-spinových väzbových konštánt a bola implementovaná do program ReSpect

Vykonali sme viaceré benchmark výpočty a sformulovali sme praktické odporúčania, aby výpočty bežali rýchle a efektívne. Metóda bola aplikovaná tak nami ako aj našimi zahraničnými partnermi na štúdium NMR parametrov systémov, obsahujúcich atómy ťažkých prvkov. Bol implementovaný model konečného jadra a bol študovaný jeho efekt na vypočítané hodnoty spin-spinových konštánt. Boli vyvinuté nové interpretačné nástroje a boli aplikované na štúdium NMR parametrov pre rôzne systémy. PhD dizertácia, ktorá bola vypracovaná v rámci procesu riešenia LPP-0326-09 projektu, bola úspešne obhájená.

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

A new efficient method for relativistic calculations of NMR spin-spin coupling constants was developed and implemented into the program ReSpect. Numerous benchmark calculations were performed and practical recommendations for running fast and efficient computations were formulated. The method was applied by us and also by our foreign partners to study NMR parameters of heavy-element compounds. A finite nucleus model for the nuclear magnetic moment was implemented and its effect on the calculated values of spin-spin couplings was studied. New interpretation tools were developed and applied to study NMR parameters for different compounds. .The PhD. work done within the LPP-0326-09 project was successfully defended.

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

Zodpovedný riešiteľ

Dr. O. Malkin, DrSc.

V Bratislave 25. 09. 2013

Štatutárny zástupca príjemcu

doc. Ing. Miroslav Boča, PhD.

V Bratislave 26. 09. 2013

.....
podpis zodpovedného riešiteľa

.....
podpis štatutárneho zástupcu príjemcu