



MICHAL REPISKÝ

Prírodovedecká fakulta
Univerzita Komenského

Číslo projektu
3129/01/02

Trvanie projektu
7/2022 - 9/2025

”

"Štipendium SASPRO2 predstavuje pre mňa jedinečnú príležitosť venovať sa výskumným aktivitám v oblasti molekulových a materiálových vlastností vychádzajúcich zo spin-orbitálnej interakciou, a tak napomáhať experimentálnej komunite navrhovať nové a jedinečné materiály. Rovnako zodpovednosť za výučbu a vedenie študentov mi umožňuje priblížiť moderný výskum v relativistickom modelovaní vysokoškólakom a postgraduálnym študentom."

ZHRNUTIE PROJEKTU

EPR and NMR spektroskopia spin-orbitálne spriahnutých paramagnetických tuhých látok

Nespárované elektróny hrajú kľúčovú rolu v mnohých chemických a fyzikálnych procesoch, ako napríklad prenos elektrónu v lítiových alebo sodíkových batériách založených na báze oxidov prechodných kovov, či katalyticky aktívnych miestach v kovovo-organických štruktúrach (MOF). Pre optimalizovanie efektivity týchto materiálov je potrebné určiť vzťah medzi ich štruktúrou a vlastnosťami. Elektrónová paramagnetická rezonancia (EPR) a paramagnetická jadrová magnetická rezonancia (pNMR) sú spektroskopie umožňujúce určovať štruktúru paramagnetických materiálov, štúdium ktorých je často podporované teoretickými výpočtami napomáhajúcimi nájsť vzťah medzi experimentálnymi spektrami a elektrónovou štruktúrou, a týmto spôsobom napomôcť ku návrhu efektívnejších materiálov. Napriek tomu, že teoretické modelovanie EPR a NMR spektier je dobre preskúmané pre molekuly v plynnej a kvapalnej fáze, v súčasnosti neexistuje relativistický prístup pre výpočet NMR spektier paramagnetických tuhých látok. Toto vytvára veľkú medzeru v schopnosti výpočtovej chémie/fyziky prispieť ku racionalizácii vzťahu medzi štruktúrou a vlastnosťami paramagnetických materiálov. Predkladaný projekt si preto kladie za cieľ vyplniť túto medzeru vývojom plne-elektrónovej relativistickej dvoj- a štvor-komponentnej metódy založenej na teórii funkcionálu hustoty (DFT) pre výpočet EPR a NMR spektier paramagnetických tuhých látok. Projekt bude stavať na vlastnom štvor-komponentnom DFT programe pre tuhé látky a expertíze s relativistickými výpočtami EPR a pNMR spektier molekúl, s cieľom dosiahnuť významný pokrok v modelovaní magnetických tuhých látok. Projekt tak umožní pokročiť vo využívaní EPR a pNMR pri štúdiu paramagnetických materiálov, zatiaľ čo zahrnutie relativistických efektov zasa umožní spoľahlivo popísať paramagnetické látky s ťažkými prvkami, ako sú napríklad oxidy prechodných kovov, relevantné ako materiály pre lítiové alebo sodíkové batérie.



MICHAL REPISKY

Prírodovedecká fakulta
Univerzita Komenského

Číslo projektu
3129/01/02

Trvanie projektu
7/2022 - 9/2025

PUBLIKÁCIE

1. Knecht et al., [*Exact two-component Hamiltonians for relativistic quantum chemistry: Two-electron picture-change corrections made simple*](#), Journal of Chemical Physics, just accepted (2022).
2. Konecny et al., [*Accurate X-ray Absorption Spectra near L- and M-Edges from Relativistic Four-Component Damped Response Time-Dependent Density Functional Theory*](#), Inorganic Chemistry 61, 830-846 (2022).
3. Pototschnig et al., [*Implementation of Relativistic Coupled Cluster Theory for Massively Parallel GPU-Accelerated Computing Architectures*](#), Journal of Chemical Theory and Computation 17, 5509-5529 (2021).
4. Senjean et al., [*Generalization of intrinsic orbitals to Kramers-paired quaternion spinors, molecular fragments and valence virtual spinors*](#), Journal of Chemical Theory and Computation 17, 1337-1354 (2021).
5. Repisky et al., [*ReSpect: Relativistic spectroscopy DFT program package*](#), Journal of Chemical Physics 152, 184101 (2020).

<https://orcid.org/0000-0003-0776-4137>