

# Relativistické kvantovochemické výpočty ako podpora experimentov v oblasti chémie ťažkých a superťažkých prvkov

Miroslav Iliáš

<sup>1</sup>Department of Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Matej Bel University, Tajovského 40, 97401 Banská Bystrica, Slovakia

<sup>2</sup>Helmholtz Institute Mainz, Johannes Gutenberg-Universität, 55099 Mainz, Germany; <sup>3</sup>GSI Helmholtzzentrum für Schwerionenforschung GmbH, Planckstrasse 1, 64291 Darmstadt, Germany;

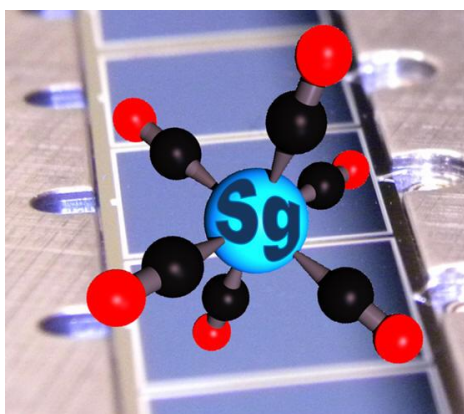
Relativistické kvantovo-chemické metódy, uvažujúce všetky elektróny systému, sú dôležitým teoretickým nástrojom v chémii ťažkých a superťažkých prvkov. Podľa elektrónového Hamiltoniánu obvykle rozoznávame: (i), štvorkomponentné metódy, založené na rigoróznom Dirac-Coulomb-(Breit) Hamiltoniáne a, (ii), dvojkomponentné, postavené na niektorom transformovanom operátore, zmieňme X2c alebo ZORA. Tieto sú výrazne rýchlejšie oproti štvorkomponentným vďaka absencii tzv. malých komponentov bázy.

Relativistické DFT a *ab-initio* Coupled-Cluster (CC) metódy pracujú s dvoj- ako aj štvorkomponentnými Hamiltoniánmi. Kombinácia DFT a CC metód sa ukazuje byť ako vhodná [1,2]. V prednáške ukážem, ako pomocou troch relativistických softvérov – DIRAC, ReSpect a ADF – skúmame molekulové a adsorpčné vlastnosti karbonylových komplexov ťažkých a superťažkých prvkov skupín 6,7 a 8, ktoré sú koncovým chemickým produktom v jadrových syntézach daných atómov.

---

[1] M.Iliáš and V. Pershina, *Inorg. Chem.*, **56**, 1638 (2017).

[2] V. Pershina and M.Iliáš, *J. Chem. Phys.*, **146**, 184306 (2017).



ZDROJ: [www.superheavies.de](http://www.superheavies.de)