

Ústav anorganickej chémie SAV

**Správa o činnosti organizácie SAV
za rok 2007**

Bratislava
január 2008

Obsah osnovy Správy o činnosti organizácie SAV za rok 2007

I.	Základné údaje o organizácii.....	3
II.	Vedecká činnosť.....	5
III.	Doktorandské štúdium, iná pedagogická činnosť a budovanie ľudských zdrojov pre vedu a techniku.....	12
IV.	Medzinárodná vedecká spolupráca.....	16
V.	Vedná politika.....	22
VI.	Spolupráca s univerzitami a inými subjektmi v oblasti vedy a techniky v SR.....	23
VII.	Spolupráca s aplikačnou a hospodárskou sférou.....	25
VIII.	Aktivity pre vládu SR, Národnú radu SR, vládu SR, ústredné orgány štátnej správy SR a iné subjekty.....	25
IX.	Vedecko-organizačné a popularizačné aktivity; ceny a vyznamenania.....	26
X.	Činnosť knižnično-informačného pracoviska.....	29
XI.	Aktivity v orgánoch SAV.....	30
XII.	Hospodárenie organizácie.....	31
XIII.	Nadácie a fondy pri organizácii.....	32
XIV.	Iné významné činnosti pracoviska.....	32
XV.	Vyznamenania, ocenenia a ceny udelené pracovníkom organizácie v roku 2007 (mimo SAV).....	32
XVI.	Poskytovanie informácií v súlade so Zákonom o slobode informácií.....	32
XVII.	Problémy a podnety pre činnosť SAV.....	32

PRÍLOHY

1.	<i>Menný zoznam zamestnancov k 31. 12. 2007.....</i>	<i>34</i>
2.	<i>Projekty riešené na pracovisku.....</i>	<i>37</i>
3.	<i>Vedecký výstup – bibliografické údaje výstupov.....</i>	<i>46</i>
4.	<i>Údaje o pedagogickej činnosti organizácie.....</i>	<i>104</i>
5.	<i>Údaje o medzinárodnej vedeckej spolupráci.....</i>	<i>106</i>

I. Základné údaje o organizácii

1. Kontaktné údaje

Názov: **Ústav anorganickej chémie SAV**
Riaditeľ: prof. RNDr. Pavol Šajgalík, DrSc.
tel: 59410 400 e-mail: uachsajg@savba.sk
Zástupca riaditeľa: Ing. Miroslav Boča, PhD.
tel: 59410 490 e-mail: uachboca@savba.sk
Vedecký tajomník: RNDr. Jana Madejová, DrSc.
tel: 59410 406 e-mail: uachjmad@savba.sk
Predseda vedeckej rady: RNDr. Peter Komadel, DrSc.
tel: 59410 464 e-mail: uachkomp@savba.sk

Adresa sídla: Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava
tel: 02-59410 401 fax: 59410 444 e-mail: uachsekr@savba.sk

Názov a adresa detašovaného pracoviska: Centrum kompetencie skla Vitrum
Laugaritio, Študentská 2, 911 50 Trenčín
tel: 032-7400 262 fax: 032-7400 522 e-mail: galusek@tnuni.sk
Vedúci detašovaného pracoviska: doc. Ing. Dušan Galusek, PhD.
tel: 032-7400 262 fax: 032-7400 522 e-mail: galusek@tnuni.sk

Typ organizácie: rozpočtová

2. Počet a štruktúra zamestnancov

ŠTRUKTÚRA ZAMESTNANCOV	K	K do 35 rokov		K ved. prac.		F	P
		M	Ž	M	Ž		
Celkový počet zamestnancov	74	13	14	29	12	70	62,97
Vedeckí pracovníci	41	9	8	29	12	37	33,29
Odborní pracovníci VŠ	15	4	3	-	-	15	14,15
Odborní pracovníci ÚS	13	-	2	-	-	13	12,20
Ostatní pracovníci	5	-	1	-	-	5	3,33
Doktorandi v dennej forme doktorandského štúdia	8	4	4	-	-	8	8

Vysvetlivky:

K – kmeňový stav zamestnancov v pracovnom pomere k 31.12.2007

F – fyzický stav zamestnancov k 31.12.2007

P – celoročný priemerný prepočítaný počet zamestnancov

3. Štruktúra vedeckých pracovníkov (kmeňový stav k 31. 12. 2007)

Rodová skladba	Pracovníci s hodnosťou				Vedeckí pracovníci v stupňoch		
	DrSc.	CSc., PhD.	prof.	doc.	I.	IIa.	IIb.
Muži	5	24	3	2	5	14	10
Ženy	2	10	0	0	2	1	9

4. Štruktúra pracovníkov zo stĺpca F v bode 2 zaradených do riešenia projektov (domácich alebo medzinárodných)

Veková štruktúra (roky)	< 30	30-35	35-40	40-45	45-50	50-55	55-60	60-65	>65
Muži	5	8	2	3	1	9	6	3	0
Ženy	5	5	2	2	1	3	3	1	0

Pozn.: Pracovníkov zaradiť podľa veku, ktorí dosiahli v priebehu roka 2007.

Priemerný vek riešiteľov projektov podľa vyššie uvedenej tabuľky:

Muži 44

Ženy 40

Priemerný vek všetkých kmeňových zamestnancov k 31. 12. 2007: 43

Priemerný vek kmeňových vedeckých pracovníkov k 31. 12. 2007: 42

5. Iné dôležité informácie k základným údajom o organizácii a zmeny za posledné obdobie (v zameraní, v organizačnej štruktúre a pod.)

Vedecké smerovanie ako aj organizačná štruktúra ÚACH SAV sa v poslednom roku výrazne nezmenila. Toto rozhodnutie pramení jednak z vhodne vybraných vedeckých zámerov zakotvených v zriaďovacej listine ústavu z roku 2003 ako aj zo schopnosti výskumných tímov zachytiť moderné trendy výskumu v takto definovanom výskumnom priestore. Túto skutočnosť potvrdila aj Akreditačná komisia SAV hodnotiaca ÚACH SAV kategórii A* na nasledujúce 4 roky.

V roku 2007 bola preradená jedna pracovníčka do kategórie IIa. V tejto súvislosti je dobré spomenúť fakt, že počet žien v zaradení „vedecký pracovník“ rastie. Vo vekovej skupine do 35 rokov je pomer mužov a žien prakticky rovnaký, keď skutočný pomer je 9/8. Vedenie ústavu naďalej podporuje zvyšovanie kvalifikácie pracovníkov s dôrazom na celoživotné vzdelávanie. V tomto roku sa viacerí pracovníci ústavu zúčastnili na kurzoch anglického jazyka, počítačových zručností, manažmentu a správnej laboratórnej praxe, ktoré boli organizované v rámci ESF projektu "Celoživotné vzdelávanie pracovníkov SAV Bratislava". Okrem toho sa študenti a mladí vedeckí pracovníci ústavu zúčastnili vzdelávacích aktivít v rámci ESF projektov (pozri Prílohu 2), ktoré sú spoluorganizované pracovníkmi ÚACH SAV.

Spolupráca vedenia ústavu s mladých pracovníkov je trvalá. V roku 2006 bol ustanovený nový poradný orgán riaditeľa „Snem mladých pracovníkov“, ktorý má svoj štatút, predsedu ako aj pravidelné stretnutia. „Snem mladých pracovníkov“ do 35 rokov sa pravidelne stretáva a rieši otázky, ktoré zaujímajú túto kategóriu zamestnancov a doktorandov. Na druhej strane vedenie ústavu a riaditeľ konzultuje s týmto orgánom otázky doktorandského štúdia, perspektívnych smerov výskumu, predovšetkým v súvislosti s očakávaným finančným zabezpečením prístrojovej infraštruktúry zo štrukturálnych fondov EÚ. Zástupca „Snemu mladých pracovníkov“ sa zúčastňuje zasadnutí vedenia ústavu.

II. Vedecká činnosť

1. Domáce projekty

ŠTRUKTÚRA PROJEKTOV	Počet projektov		Pridelené financie na rok 2007	
	A organizácia je nositeľom projektu *	B organizácia sa zmluvne podieľa na riešení projektu	A	B
1. Vedecké projekty, ktoré boli v r. 2007 financované VEGA	9	1	1 827 000	64 000
2. Vedecké projekty, ktoré boli roku 2007 financované APVT (APVV)	3	3	4 532 000 z toho 1 302 000 odoslané spoluriešiteľom	255 000
3. Účasť na nových výzvach APVV r. 2007**	3	2	9 648 000 z toho 4 590 000 odoslané spoluriešiteľom	1 762 000
4. Projekty riešené v rámci ŠPVV		1		1 513 000
5. Projekty centier excelentnosti SAV		2		287 000
6. Vedecko-technické projekty, ktoré boli v r. 2007 financované				
7. Projekty podporované Európskym sociálnym fondom		4 [#]		0 [#]
8. Iné projekty (ústavné, na objednávku rezortov a pod.)	3		623 399	

*Pracovisko vedúceho projektu, zodpovedného riešiteľa, zhotoviteľa, vedúceho centra alebo manažéra projektu.

** Uviesť projekty so začiatkom financovania v roku 2007

Financovanie projektov ESF je realizované cez hlavného koordinátora (nositeľa) projektu, údaje sú v prílohe 2.

Najvýznamnejšie výsledky vedeckej práce

a) základného výskumu (uviesť číslo projektu a agentúru, ktorá ho financuje)

Molekulový prenos energie v systémoch vrstevnatých kremičitanov a organických farbív J. Bujdák, A. Czímerová

V systémoch rhodamínu so vzorkami vrstevnatých kremičitanov (disperzie, filmy) sme pozorovali vznik supramolekulových zoskupení katiónov farbiva. Výsledky fluorescenčných spektier naznačovali neradiačný prenos energie medzi rôznymi formami farbiva. Prenos energie do vzdialeností niekoľkých nanometrov bol priamo dokázaný pre zložitejšie systémy dvoch farbív. Molekuly jedného z farbív (rhodamín) vystupovali ako molekulové antény absorbujúce zelené svetlo ($\lambda=500-520$ nm). Následne prebiehal neradiačný prenos energie na molekuly druhého farbiva (oxazín). Toto sa prejavilo znížením emisie zelenožltého svetla z rhodamínu (580 nm) v prospech emisie červeného svetla z molekúl oxazínu (okolo 635 nm), pričom molekuly oxazínu neboli priamo excitované svetlom. Výtazok prenosu energie závisel od vzdialenosti medzi molekulami farbiva ovplyvnených hustotou náboja kremičitanu. Pomocou anorganického nosiča možno ovplyvňovať fotochemické procesy, ktoré prebiehajú medzi adsorbovanými molekulami farbiva.

Projekt APVV-51-027405 (Ústav anorganickej chémie SAV)

Molecular energy transfer in the systems based on layered silicates and organic dyes

Bujdák, J., Martínez Martínez, V., López Arbeloa, F., Iyi N., Spectral properties of rhodamine 3B adsorbed on the surface of montmorillonites with variable layer charge. In *Langmuir* Vol. 23 (2007), p. 1851-1859, (3,902 - IF₂₀₀₆).

Czímerová, A., Iyi, N., Bujdák, J., Energy transfer between rhodamine 3B and oxazine 4 in synthetic-saponite dispersions and films. In *Journal of Colloid and Interface Science* Vol. 306 (2007), p. 316-322, (2,233 - IF₂₀₀₆).

Czímerová, A., Bujdák, J., Iyi, N., Fluorescence resonance energy transfer between laser dyes in saponite dispersions. In *Journal of Photochemistry & Photobiology, A: Chemistry*, Vol. 187 (2007), p. 160-166, (2,098 - IF₂₀₀₆).

b) aplikačného typu (uviesť používateľa, napr. SME, spin off a p.)

Laboratórne skúmanie tvorby peny a jej stability pri tavení kmeňa E-skla M. Liška, J. Kraxner, R. Klement

V rámci riešenia projektu APVV-20-P06405 „Optimalizácia tavenia skloviny EUTAL“ sa na pracovisku VILA vyvinulo experimentálne zariadenie na laboratórne skúmanie tvorby peny a jej stability pri tavení sklárskych kmeňov. V spolupráci so sklárňou Johns Manville Slovakia, a.s. Trnava sa skúmali vznik a stabilita peny pri tavení sklárskeho kmeňa E-skla. Podstatu prevádzkového pokusu tvorila modifikácia sklárskeho kmeňa - postupná náhrada kyseliny trihydrogénboritej H_3BO_3 kolemanitom $CaB_3O_4(OH)_3 \cdot H_2O$. Súčasne sa v laboratórnych podmienkach skúmala stabilita pien pri tavení kmeňov použitých pri prevádzkovom veľkopokuse v reprodukovateľných a konštantných experimentálnych podmienkach umožňujúcich separovať vplyv substitúcie kyselina boritá/kolemanit od vplyvu ostatných prevádzkových faktorov. Výsledkom laboratórnych testov bolo nájdenie

štatisticky významného trendu znižovania stability peny pri náhrade kyseliny boritej kolemanitom. To v prevádzkových podmienkach umožnilo zvyšovať taviaci výkon bez zníženia kvality vyrábaného E-vlákná.

Z pohľadu optimalizácie tavenia E skla sa dosiahol technologicky významný výsledok.

Laboratory investigation of foam formation and stability during the E-glass melting

- c) **medzinárodných vedeckých projektov** (uviest' zahraničného partnera alebo medzinárodný program)

Vývoj novej metódy pre teoretickú predpoveď a interpretáciu NMR spektier zlúčenín obsahujúcich ťažké prvky

S. Komorovský, M. Repiský, P. Hrobárik, O. Malkin, V. Malkin

Jadrová magneticko rezonančná (NMR) spektroskopia je vhodnou metódou na určovanie štruktúry lantanoidových a aktinoidových komplexov v roztoku. Keďže takéto NMR experimenty sú veľmi komplikované, často drahé a môžu vyžadovať špeciálne bezpečnostné opatrenia, teoretické predpovedanie výsledných spektier je veľmi žiadúce. Bola vyvinutá a implementovaná nová relativistická kvantovochemická metóda pre výpočet NMR spektier ťažkých prvkov. Je založená na riešení Dirakovej rovnice na báze teórie funkcionálu hustoty použitím bázy závislej od magnetického poľa. Umožňuje zlepšiť presnosť pri predpovedi a interpretácii NMR spektier zlúčenín obsahujúcich lantanoidy a aktinoidy. Možno očakávať aj jej praktické využitie, napr. pri určovaní štruktúr zlúčenín obsahujúcich rádionuklidy prítomných v jadrovom odpade alebo pri návrhoch nových kontrastných látok pre NMR tomografiu.

Medzinárodný program: EURATOM FP6 Integrated Project "Fundamental Processes of Radionuclide Migration" (FUNMIG, cf. www.funmig.com)

Development of a new method for theoretical prediction and interpretation of NMR spectra for compounds containing heavy elements

Publikácia: S. Komorovský, M. Repiský, O.L. Malkina, V.G. Malkin, I. Malkin Ondik, M. Kaupp: A fully relativistic method for calculation of nuclear magnetic shielding tensors with a restricted magnetically balanced basis in the framework of the modified matrix Dirac-Kohn-Sham equation, *J. Chem. Phys.*, prijatá do tlače.

d) príprava na čerpanie štrukturálnych fondov EÚ

Ústav je trvalo prístrojovo podvyživený aj vzhľadom na fakt, že technologické ako aj meracie zariadenia súvisiace s výskumným zameraním ústavu sú mimoriadne finančne náročné. V snahe dlhodobo dosahovať európsku úroveň výskumu a vzdelávania v doktorandskom štúdiu sa vedenie ústavu seriózne pripravovalo na čerpanie štrukturálnych fondov EÚ. Zástupcovia ústavu sa aktívne podieľali na tvorbe štátnej vednej politiky v oblasti rozvoja infraštruktúry (zástupcovia ÚACH v programových rádoch MŠ SR) ako aj na vytváraní koncepcie a presadzovaní existencie Technologického inštitútu SAV, ktorého je ÚACH SAV jedným zo zakladajúcich členov.

V súčasnosti je ústav navrhovateľom dvoch projektov do výzvy Vytvárania siete excelentných pracovísk, ktorá ma byť zverejnená vo februári 2008.

3. Vedecký výstup (*bibliografické údaje výstupov uviesť v Prílohe č. 3*)

PUBLIKAČNÁ, PREDNÁŠKOVÁ A EDIČNÁ ČINNOSŤ	Počet v r. 2007 a doplňky z r. 2006
1. Vedecké monografie * vydané doma	
2. Vedecké monografie vydané v zahraničí	
3. Knižné odborné publikácie vydané doma	
4. Knižné odborné publikácie vydané v zahraničí	1
5. Kapitoly v publikáciách ad 1/	
6. Kapitoly v publikáciách ad 2/	
7. Kapitoly v publikáciách ad 3/	
8. Kapitoly v publikáciách ad 4/	
9. Vedecké práce v časopisoch evidovaných a/ v Current Contents b/ v iných medzinárodných databázach	60
10. Vedecké práce v ostatných časopisoch	3
11. Vedecké práce v zborníkoch (konferenčných aj nekonferenčných, vydaných tlačou alebo na CD) a/ recenzovaných b/ nerecenzovaných	3 14
12. Vedecké práce v zborníkoch rozšírených abstraktov	
13. Recenzie vedeckých prác vo vedeckých časopisoch	
14. Prednášky a vývesky na vedeckých podujatiach s min. 30% zahraničnou účasťou	78
15. Ostatné prednášky a vývesky	8
16. Vydávané periodiká evidované v Current Contents	
17. Ostatné vydávané periodiká	
18. Vydané alebo editované zborníky z vedeckých podujatí	
19. Vysokoškolské učebnice a učebné texty	
20. Vedecké práce uverejnené na internete a/ v cudzom jazyku b/ v slovenčine	
21. Preklady vedeckých a odborných textov	

* Publikácia prináša nové vedecké poznatky, alebo sa opiera o vedecké práce.

4. Vedecké recenzie, oponentúry

Vyžiadané recenzie rukopisov monografií a vedeckých prác v zahraničných časopisoch, príspevkov na konferencie s medzinárodnou účasťou, oponovanie grantových projektov	Počet v r. 2007 a doplnok z r. 2006 85
--	---

5. Ohlasy

CITÁCIE	Počet v r. 2006	Doplnok za r. 2005
Citácie vo WOS	883	
Citácie podľa iných indexov a báz, napr. SCOPUS, s uvedením prameňa	10	
Citácie v monografiách, učebniciach a iných publikáciách	41	

Zoznam pozvaných príspevkov na medzinárodných konferenciách

Autor/autori, názov príspevku, konferencia, v prípade publikovania uviesť prameň

1. D. Galusek: „Advanced sintering methods for preparation of nanostructured ceramics“, VI Konferencja Polskiego Towarzystwa Ceramicznego, Zakopane, Poland, 13.-16. 9. 2007
2. K. Hirao, Y. Zhou, X. Zhu, Z. Lenčoš, P. Šajgalík: „Processing parameters affecting thermal and mechanical properties on sintered reaction-bonded nitrides“, 2. International Symposium on Sialons and Non-Oxide, Ise-Shima, Mie, Japan, 2.-5. 12. 2007
3. S. Kedžuch, J. Šimunek, J. Noga: „Different considerations for second order R12/F12 theory“ Highly Accurate Calculations of Molecular Electronic Structure, Bad Herrenalb, Germany, 22.-24. 3. 2007
4. P. Komadel, J. Hrachová: „Clay minerals used in polymer-clay composites“. Nanoved 4th International Conference on Nanoscience and Nanotechnologies. Bratislava, 2007
5. A. Kožuško, A. Sinani, L. Lytvynov, V. Šída, D. Galusek: „Ceramic protection against AP threats“, 5th Light Weight Armour Group Meeting, Roedental, Germany, 5. 10. 2007
6. Z. Lenčoš, M. Hnatko, P. Šajgalík, D. Galusek: „Silicon nitride based composites with tailored mechanical and functional properties“, 2nd International Conference on Recent Advances in Composite Materials, New Delhi, India, 20.-23. 2. 2007
7. Z. Lenčoš, P. Šajgalík, T. Plachký, Y. Zhou, K. Hirao, R. Riedel: „Effect of polymer derived ceramics and ternary nitride sintering aids on the thermal conductivity of silicon nitride“, International Symposium on Advanced Ceramics and Technology for Sustainable Energy Applications, ACTSEA 2007, Kenting Henchun Town, Taiwan, 4.-7. 11. 2007
8. Z. Lenčoš, P. Šajgalík, T. Plachký, Y. Zhou, K. Hirao, R. Riedel: „Ternary nitrides with thermo electrical and optical properties and related silicon nitride-based composites“, MRS Fall Meeting, Symposium Q: Nitrides and Related Bulk Materials, Boston, USA, 26.-30.11. 2007

9. J. Noga: „MP2-R12 versus dual basis MP2 theory“, Molecular Quantum Mechanics - Analytic Gradients and Beyond, Budapest, Hungary, 29.5.-3.6. 2007
10. J. Noga: „Second quantization framework for the treatment of the operators partitionings - a tool to understand R12 theories“, Molecular Theory for Real Systems, Kyoto, Japan, 27.-29. 7. 2007
11. O. Malkin: „A fully relativistic generalized kinetically balanced method for calculation of EPR and NMR parameters in the framework of the modified matrix Dirac-Kohn-Sham equation“, Conference on Relativistic Effects in Heavy Elements - REHE 2007, Ottrot, France, 21.-25.03.2007
12. P. Šajgalík, Z. Lenčoš, M. Hnatko, D. Salamon, J. Sedláček, D. Galusek: „Oxide and non-oxide composites for ceramic tools applications“, 10th International Conference and Exhibition of the European Ceramic Society, Berlin, Germany, 17.-21. 6. 2007
13. P. Šajgalík, J. Křesťan, Z. Lenčoš, T. Plachký: „Sialons from aluminosilicates, processing, RT properties, corrosion and oxidation resistance“, 2. International Symposium on Sialons and Non-Oxide, Ise-Shima, Mie, Japan, 2.-5. 12. 2007
14. P. Šajgalík, Z. Lenčoš: „Polymer derived ceramics: hybrid processing“, 59. Zjazd chemikov, Tatranske Matliare, Slovakia, 2.-6. 9.2007

Zoznam iných významných ohlasov

1. J. Bujdák: „Optické vlastnosti modifikovaných silikátov“. Vyžiadaná prednáška na seminári: Nanomateriály na bázi interkalátů a povrchově modifikovaných struktur, organizovanom Českou a slovenskou kryštalografickou spoločnosťou a Centrom nanotechnológií na VŠB-TU Ostrava 22. 3. 2007.
2. O. Malkin: „Recent developments in relativistic calculations of EPR parameters“, The 8th deMon developers' workshop, Paris, France, 31.8.-3. 9. 2007
3. V. Malkin: „Four-component calculations of NMR chemical shifts in the framework of the modified matrix Dirac-Kohn-Sham equation“, The 8th deMon developers' workshop, Paris, France, 31.8.-3. 9. 2007
4. P. Šajgalík: „Nanotechnológie a nanomateriály – pokus o úvod do diskusie“, 59. Zjazd chemikov, Tatranské Matliare, Slovakia, 2.-6. 9. 2007

6. Patentová a licenčná činnosť

a) Vynálezy, na ktoré bol udelený patent v roku 2007

na Slovensku (uviesť počet) 1

Patent č. 285523: Kryštáľové sklo bez olova, bária, nióbu a ich zlúčenín a spôsob prípravy. Autori: P. Šimurka, P. Vrábel, V. Petrušková, M. Liška, V. Macho, majiteľ RONA a.s., Lednické Rovne, udelený 2007

v zahraničí (uviesť počet)

b) Vynálezy prihlásené v roku 2007

na Slovensku

v zahraničí

c) Predané licencie

na Slovensku (uviesť predmet licencie a nadobúdateľa)

- v zahraničí (uviesť krajinu, predmet licencie a nadobúdateľa licencie)

d) Realizované patenty

- na Slovensku
- v zahraničí

7. Komentáre k vedeckému výstupu a iné dôležité informácie k vedeckým aktivitám pracoviska

Publikačná aktivita pracovníkov sa v posledných rokoch výrazne nemení. Počet karentovaných publikácií v tomto roku dosiahol číslo 60, čo pri počte 33,3 vedeckých pracovníkov (prepočítaný stav, podľa Tabuľky 2, str. 3) znamená 1,8 karentovanej publikácie na vedeckého pracovníka. Cieľom je dosiahnuť dve publikácie na vedeckého pracovníka, ktorý zodpovedá štandardu vyspelých vedeckých pracovísk s podobným zameraním. Priemerný impakt faktor časopisov, v ktorých boli práce uverejnené, bol 1,57. Citovanosť na vedeckého pracovníka (prepočítaný stav) je 26,8 citácie. Potešiteľný je trvalý trend rastu počtu citácií a ich získavanie pracovníkmi všetkých oddelení ústavu. Dlhodobo v tejto položke dosahuje najvyšší počet Oddelenie teoretickej chémie, v poslednom období je mu dobrým partnerom Oddelenie hydrosilikátov a ostatné oddelenia zaznamenávajú tiež trvalý rast počtu citácií.

V roku 2007 zahájili činnosť dve Centrá excelentnosti SAV, na ktorých participuje ústav. Sú to: Centrum nanoštruktúrnych materiálov (NANOSMART) a Centrum pokročilej výpočtovej chémie (COMCHEM), ktorého vedúcim je prof. RNDr. Jozef Noga, DrSc.

Relatívne vysoké renomé pracovníkov ústavu vo vedeckej komunite je dokumentované aj vysokým počtom vyžiadaných prednášok vedeckých pracovníkov ústavu na medzinárodných vedeckých podujatiach, ktorých bolo 14 v roku 2007, niektoré na veľmi významných svetových konferenciách. Tento fakt bol vyzdvihnutý aj jedným z posudzovateľov Akreditačnej správy ústavu, profesorom F. Aldingerom, riaditeľom Max-Planck-Institute pre výskum kovov v Štuttgarte. Prof. Aldinger dokonca tento parameter prioritizoval pred ohlasmi na vedecké práce v renomovaných časopisoch.

V roku 2006 pracovníci ústavu podali 7 projektov v rámci výziev APVV, z toho 5 projektov bolo v r. 2007 financovaných (Tab. II, 1.) - v 3 prípadoch bol ústav nositeľom projektu a v 2 prípadoch spoluriešiteľom. Pri celkove nízkej úspešnosti v rámci APVV výziev, ktorá je na úrovni 12 až 15 %, projekty z ÚACH boli úspešné na 71 %, čo tiež svedčí o správnej koncepcii výskumu ako aj o vysokej kvalite riešiteľských kolektívov.

8. Účasť na rozvoji vednej politiky SR (štúdie, legislatívne iniciatívy a p.)

III. Doktorandské štúdium, iná pedagogická činnosť a budovanie ľudských zdrojov pre vedu a techniku

Údaje o doktorandskom štúdiu

Forma	Počet k 31.12.2007				Počet ukončených doktorantúr v r. 2007					
	Doktorandi				úspešnou obhajobou				Ukončenie z dôvodov	
	celkový počet		z toho novoprijatí				Uplýnutím času určeného na štúdium	neobhájením dizertačnej práce alebo neudelením vedeckej hodnosti	Rodinných, zdravotných a iných, resp. bez udania dôvodu	nevykonania odbornej skúšky
	M	Ž	M	Ž	M	Ž				
Denná	4	4	1	1	2	1	4	0	0	0
Externá	1	2	0	1	0	2	0	0	0	0

Zmena formy doktorandského štúdia

	Počet
Preradenie z dennej formy na externú	0
Preradenie z externej formy na dennú	0

Prehľad údajov o doktorandoch, ktorí ukončili doktorandské štúdium úspešnou obhajobou

Meno doktoranda	Forma DŠ	Mesiac, rok nástupu na DŠ	Mesiac, rok obhajoby	Číslo a názov vedného odboru	Meno a organizácia školiťela	Fakulta udeľujúca ved. hodnosť
Petrušková Viera	Externá	01/2000	04/2007	28-02-9 Anorg. tech. a mater.	Šajgalík Pavol prof. RNDr. DrSc. ÚACH SAV	FCHPT STU Bratislava
Chromčíková Mária	Externá	09/2002	04/2007	28-02-9 Anorg. tech. a mater.	Liška Marek, prof. Ing. DrSc. ÚACH SAV	FCHPT STU Bratislava
Milko Matúš	Denná	11/2001	01/2007	11-56-9 Chem. fyzika	Noga Jozef, prof.RNDr. DrSc. ÚACH SAV	PríF UK Bratislava
Sládkovičová Mariana	Denná	10/2002	09/2007	11-56-9 Chem. fyzika	Smrčok Ľubomír, RNDr. CSc. ÚACH SAV	PríF UK Bratislava
Kedžuch Stanislav	Denná	10/2003	06/2007	11-56-9 Chem. fyzika	Noga Jozef, prof.RNDr. DrSc. ÚACH SAV	PríF UK Bratislava

Údaje o pedagogickej činnosti

PEDAGOGICKÁ ČINNOST'	Prednášky		Cvičenia *	
	doma	v zahraničí	doma	v zahraničí
Počet prednášateľov alebo vedúcich cvičení**	5		10	
Celkový počet hodín v r. 2007	74		547	

* – vrátane seminárov, terénnych cvičení a preddiplomovej praxe

** – neuvádzať pracovníkov, ktorí sú na dlhodobých stážach na univerzitách

Prehľad prednášateľov predmetov a vedúcich cvičení, s uvedením názvu predmetu, úväzku, katedry a vysokej školy je uvedený v **Prílohe č. 4**.

1.	Počet pracovníkov, ktorí pôsobili ako vedúci alebo konzultanti diplomových prác:	3
2.	Počet vedených alebo konzultovaných diplomových prác:	3
3.	Počet pracovníkov, ktorí pôsobili ako školitelia doktorandov (PhD.):	11
4.	Počet oponovaných dizertačných a habilitačných prác:	7
5.	Počet pracovníkov, ktorí oponovali dizertačné a habilitačné práce:	4
6.	Počet pracovníkov, ktorí pôsobili ako členovia komisií pre obhajoby doktorandských dizertačných prác:	9
7.	Počet pracovníkov, ktorí pôsobili ako členovia komisií pre obhajoby doktorských dizertačných prác:	4
8.	Počet pracovníkov, ktorí pôsobili ako členovia komisií, resp. oponenti v inauguračnom alebo habilitačnom konaní na vysokých školách.	3

	Menný prehľad pracovníkov, ktorí boli menovaní do spoločných odborových komisií pre doktorandské štúdium	Menný prehľad pracovníkov, ktorí pôsobili ako členovia vedeckých rád fakúlt a univerzít* a správnych rád univerzít	Menný prehľad pracovníkov, ktorí získali vyššiu vedeckú, pedagogickú hodnosť alebo vyšší kvalifikačný stupeň (s uvedením hodn./stupňa) *
	P. Šajgalík (FCHPT STU, TnUAD, HF TU Košice)	P. Šajgalík (TnUAD, ÚPHV TnUAD, VUT Brno, HF TU Košice)	E. Scholtzová (IIa)
	D. Galusek (FCHPT STU)	D. Galusek (ÚPHV TnUAD)	
	M. Liška (FCHPT STU, TnUAD)	M. Liška (TnUAD, FPT TnU AD, VŠCHT Praha)	
	J. Madejová (FCHPT STU)		
	Z. Lenčoš (FCHPT STU)		
	J. Bujdák (PriFUK)		
	M. Drábik (PriFUK)		
	P. Komadel (PriFUK)		
	V. Malkin (PriFUK)		
	J. Noga (PriFUK)		

* V zátvorke uviesť aj príslušné vysoké školy.

Zoznam spoločných pracovísk SAV s vysokými školami a inými inštitúciami s uvedením stručných výsledkov spolupráce. Na základe týchto údajov bude zoznam spoločných pracovísk v Správe o činnosti SAV oproti minulému roku aktualizovaný a zaradia sa iba pracoviská tu uvedené.

Centrum pre multidisciplinárny výskum pokročilých materiálov (MULTIDISC)

Centrum MULTIDISC bolo zriadené na základe zmluvy medzi Fyzikálnym ústavom SAV, Elektrotechnickým ústavom SAV, Ústavom anorganickej chémie SAV a Ústavom materiálov a mechaniky strojov SAV za účelom výskumu štruktúry perspektívnych kovových, polovodičových, supravodivých, izolačných a kompozitných materiálov na nanometrovej úrovni.

Zoznam spoločných pracovísk ÚACH SAV s univerzitami je uvedený v časti VI, bod 4.

Iné dôležité informácie k pedagogickej činnosti

(najmä skúsenosti s doktorandským štúdiom)

V súčinnosti s FCHPT STU Bratislava Ústav anorganickej chémie požiadal o reakreditáciu doktorandského štúdia v odbore 5.2.19 Anorganická technológia a materiály s dobou štúdia 4 roky. Zmena dĺžky štúdia z troch na štyri roky bola vyvolaná reálnym ohodnotením náročnosti doktorandského štúdia v tomto odbore. V roku 2007 Akreditačná komisia schválila žiadosť ÚACH (ako externej vzdelávacej inštitúcie) o reakreditáciu doktorandského študijného programu, a tak ústav v roku 2007 už prijímal doktorandov na štvorročné štúdium.

V roku 2007 bolo na ÚACH SAV vypísaných celkovo 10 tém na vypracovanie dizertačnej práce so začiatkom štúdia v roku 2007, na ktoré sa prihlásili 5 záujemcovia. V porovnaní s minulými rokmi sme zaznamenali menší záujem absolventov univerzít o doktorandské štúdium. Podobný pokles záujmu sa pozoroval aj na celoakademickej úrovni. Z celkového množstva prijatých absolventov (5) nastúpili na štúdium traja, dvaja v dennej forme a jeden v externej forme štúdia. Všetci novoprijatí doktorandi nastúpili na štúdium v odbore Anorganická technológia a materiály. Štúdium sa uskutočňuje v spolupráci s FCHPT STU.

V októbri 2007 sa uskutočnila pravidelne organizovaná Súťaž vedeckých prác mladých pracovníkov na pôde ÚACH SAV. Na súťaži sa zúčastnili mladí pracovníci a doktorandi nášho ústavu (6) a jeden reprezentant Ústavu anorganické chemie AV ČR. Odborná komisia udelila jedno prvé miesto (Mgr. M. Derszi, PhD.) a tri druhé miesta (Ing. Š. Lojanová, Ing. A. Bláhová, Mgr. S. Komorovský). Ing. A. Bláhová sa zúčastnila tejto súťaže ako víťazka podobnej súťaže organizovanej na našom partnerskom pracovisku v Řeži u Prahy (ÚACH AV ČR). Odborná komisia konštatovala, že príspevky mali veľmi vysokú úroveň a to ako v kvalite vedeckých výsledkov tak aj v úrovni ich prezentácie.

V roku 2007 sa do súťaže o Cenu Štefana Schwarza úspešne zapojila jedna mladá vedecká pracovníčka z ÚACH (Ing. V. Petrušková, PhD.) a získala finančný príspevok z podporného fondu na vytváranie postdoktorandských miest v SAV.

Na ÚACH vznikol v roku 2006 Snem mladých vedeckých pracovníkov (ako poradný orgán riaditeľa ústavu), ktorý združuje doktorandov a ľudí s VŠ vzdelaním do 35 rokov. Vďaka svojmu reprezentantovi, ktorý je členom vedenia ústavu, majú doktorandi možnosť aktívne sa podieľať na chode celého ústavu a zapájať sa aj do aktivít, ktoré priamo nesúvisia s ich doktorandským štúdiom.

IV. Medzinárodná vedecká spolupráca

Medzinárodné projekty

DRUH PROJEKTU	Počet projektov		Pridelené financie na rok 2007 (prepočítané na Sk)	
	A organizácia je nositeľom projektu *	B organizácia sa podieľa na riešení projektu	A	B
1. Projekty 6. rámcového programu EÚ (neuvádzať projekty ukončené pred r. 2007)		3		2 247 959 z toho <i>1 842 959 EU</i> <i>405 000 ŠR</i>
2. Projekty 7. rámcového programu EÚ				
3. Multilaterálne projekty v rámci vedeckých programov COST, INTAS, EUREKA, ESPIRIT, PHARE, NATO, UNESCO, CERN, IAEA, ESF (European Science Foundation) a iné.	2		72 000	
4. Projekty v rámci medzivládnych dohôd o vedecko-technickej spolupráci (Grécko, ČR, Nemecko a iné).				
5. Bilaterálne projekty	3		-	
6. Iné projekty financované alebo spolufinancované zo zahraničných zdrojov	2		-	

* Koordinátor alebo analogicky ako pri tabuľke II. 1.

Úspešnosť v získavaní projektov 7. RP EÚ: počet akceptovaných, resp. financovaných projektov/počet podaných návrhov.

0/3

Najvýznamnejšie prínosy MVTS ústavu vyplývajúce z uskutočnenej mobility a riešenia medzinárodných projektov

Krátkodobé pobyty pracovníkov ústavu zamerané na riešenie projektov

Miroslav Boča

CNRS-CRMHT, Orléans, Francúzsko, 3.–10.12.2007. Pobyt sa uskutočnil v rámci projektu APVT 51-008104. Náplňou práce bolo meranie NMR charakteristík multijadrovou NMR technikou. MAS NMR spektroskopia sa použila na charakterizáciu oxofluoridových zlúčenín na báze tantalu a nióbu v tuhom stave.

Adriana Czímerová

Katholieke University Leuven, Surface Chemistry & Catalysis, Leuven, Belgicko, 1.–31. 10. 2007. Experimentálna práca na téme: „Prenos energie medzi dvomi kationmi farbiva na Langmuir-Blodgettových filmoch ílových minerálov“. Pobyt bol čiastočne financovaný z prostriedkov APVV 027 45.

Alexander Čeklovský

Ústav anorganickej chémie AV ČR, Řež u Prahy, 11.–17. 6 2007. Experimentálna práca v rámci riešenia projektu APVV 027 405.

Juraj Bujdák

- National Institute for Materials Science, Tsukuba, Japonsko, 20. 2.-20. 3. 2007. Práca na báze bilaterálnej spolupráce so skupinou Dr. Iyihou a úloh projektu APVV 027 405. Príprava a charakterizácia hybridných materiálov anorganických nosičov a organických farbív: 1. Fotochemické vlastnosti LDH materiálov s aniónovými porfyrínmi. 2. Prenos energie v systémoch s rhodamínovými farbivami v koloidoch a vrstvách kremičitanov.
- Ústav všeobecnej, anorganickej a teoretickej chémie, Univerzity v Innsbrucku, Rakúsko, 5.–30. 11. 2007. Práca na spoločnom projekte so skupinou Prof. Rodeho. Študoval sa vplyv chiralít kationového polyelektrolytu (peptidu) na chemické vlastnosti komplexu so smektitom: Stereoselektívna adsorpcia (projekt Chemical Evolution, BMWF-45.530/0003-11/6a/2007) a možnosti pre prípravu systémov s aniónovými organickými farbivami (Projekty VEGA 6180 a APVV 027 405).

Dušan Galusek

- Stretnutie zodpovedných riešiteľov projektu NATO SfP 981770 „Light weight and transparent armours“. Kijev, Ukrajina, 27.–29. 4. 2007. Rokovania sa účastnili zástupcovia Ioffeho inštitútu, Ústavu pre rast kryštálov, Charkov, Ukrajina, Saint Gobain Advanced Ceramics Turnov, Česká republika.
- Návšteva VITO - Flemish Institute for Technological Research, Mol, Belgicko, 22.–24. 10. 2007. Spolupráca pri riešení projektu APVV 0485-06, odlievanie keramických pásovk, spoločne s prof. M. Černákom, FMFI UK Bratislava.

Lubomír Hric

Technische Univesitat Darmstadt, Nemecko, 5. 7.-28. 9. 2007. Pobyt sa uskutočnil v rámci výmenného pobytu projektu DAAD. Náplňou práce bola príprava SiOC keramického materiálu organickou syntézou a následnou pyrolýzou.

Stanislav Kedžuch

Graduate School of Information Science, Nagoya University, Nagoya, Japan, 18.10.-21. 12. 2007. Výsledkom spolupráce s prof. Seiichiro Ten-nom počas pobytu je článok („Explicitly Correlated Coupled Cluster F12 Theory with Single and Double Excitations“) pripravený na zaslanie do časopisu.

Stanislav Komorovský

Würzburg University, Würzburg, Nemecko, 15.–29. 7. 2007. Práca na spoločnom projekte so skupinou Prof. Kauppa na rozšírení programu ReSpect o nový integrálový modul *INTEREST*. Výsledkom je podstatné zvýšenie efektivity celej SCF procedúry a aplikovateľnosti programu na väčšie systémy obsahujúce ťažké prvky vrátane aktinoidov a lantanoidov. Pobyt bol financovaný z prostriedkov 6RP FUNMIG.

Zoltán Lenčes

Advanced Manufacturing Research Institute, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, Nagoya, Japonsko, 8. 10.–10. 11. 2007, "Joint Bilateral Research Project supported by Japan Society for the Promotion of Science (JSPS) "

Štefánia Lojanová

- UFM ČAV, Brno, Česká republika, 17.–25. 5. 2007. Pobyt sa uskutočnil v rámci projektu APVV 0171-06. Náplňou práce bolo vyhodnocovanie lomovej húževnatosti vzoriek na báze $\text{Si}_3\text{N}_4/\text{SiC}$ s rôznymi prídavkami spekacích prísad metódou CVN.
- Technische Universität Darmstadt, Fachgebiet Material Wissenschaft, Darmstadt, Nemecko, 16. 7.–30. 9. 2007. Pobyt sa uskutočnil v rámci projektu DAAD. Náplňou práce bola charakterizácia vzoriek na báze $\text{Si}_3\text{N}_4/\text{SiC}$ s rôznymi prídavkami spekacích prísad pomocou Ramanovej a MAS NMR spektroskopie

Helena Pálková

- Institute of Catalysis and Surface Chemistry, Polish Academy of Sciences, Poľsko, 23.-30. 5. 2007. Riešenie spoločného poľsko-slovenského projektu " Novel porous materials based on layered silicates ". Pobyt sa uskutočnil v rámci medziakademickej výmeny.
- Laboratoire HydrASA, UMR6532-CNRS, Université de Poitiers, France, 1.11.2007-31.1.2008. Pracovný pobyt zameraný na riešenie projektu: „Study of chemical partitioning of lithium in hectorites : experimental approach“

Martin Pentrák

Laboratoire HydrASA, UMR6532-CNRS, Université de Poitiers, POITIERS, France, 5. 11.–07. 12. 2007. Riešenie projektu SAIA.

Tomáš Plachký

- Dipartimento di Fisica and Dipartimento di Ingegneria dei Materiali e Tecnologie Industriali, Università di Trento, Trento, Taliansko, 20.–23. 3. 2007. Pobyt sa uskutočnil v rámci projektu PolyCerNet MRTN-CT-019601. Náplňou práce bolo absolvovanie praktickej časti kurzov „Optical properties of materials and XRD techniques for materials“, tieto kurzy boli organizované pre študentov zapojených do projektu PolyCerNet.
- University POLITEHNICA of Bucharest, Bucharest, Rumunsko, 19.–28.9.2007. Pracovný pobyt sa uskutočnil v rámci projektu PolyCerNet MRTN-CT-019601. Náplňou pobytu bola trojdenná letná škola reologie PolyCerNet Rheology School v Bukurešti a Iasi

a stretnutie riešiteľov projektu PolyCerNet v Gura Humorului, na ktorom predniesli všetci študenti projektu PolyCerNet výsledky svojej práce.

- Technische universität Darmstadt, Darmstadt, Nemecko, 5.–7. 9. 2007. Pracovný pobyt sa uskutočnil v rámci projektu PolyCerNet MRTN-CT-019601.. Náplňou práce bola príprava polymeru na bázi polysiloxanu a následná pyrolýza, resp. crosslinking pripraveného polymeru. Pyrolyzovaný a crosslinkovaný polymer sú základnou zložkou keramických kompozitov, ktoré sa pripravujú v rámci projektu PolyCerNet.
- Advanced Manufacturing Research Institute, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, Nagoya, Japonsko, 8. 10.–10. 11. 2007. Joint Bilateral Research Project supported by Japan Society for the Promotion of Science (JSPS).

Michal Repiský

Würzburg University, Würzburg, Nemecko, 15.–29. 7. 2007. Práca na spoločnom projekte so skupinou Prof. Kauppa na rozšírení programu ReSpect o nový integrálny modul *INTEREST*. Výsledkom práce je podstatné zvýšenie efektivity celej SCF procedúry a aplikovateľnosti programu na väčšie systémy obsahujúce ťažké prvky vrátane aktinoidov a lantanoidov. Pobyt bol financovaný z prostriedkov 6RP FUNMIG.

Pavol Šajgalík

Advanced Manufacturing Research Institute, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, Nagoya, Japonsko, 8.–18. 10. 2007. Joint Bilateral Research Project supported by Japan Society for the Promotion of Science (JSPS).

František Šimko

CNRS-CRMHT, Orléans, Francúzsko, 3.–10. 12. 2007. Pobyt sa uskutočnil v rámci projektu APVT 51-008104. Náplňou práce bolo meranie NMR charakteristík multijadrovou MAS NMR technikou. Touto metódou sa charakterizovali vzorky v systéme kryolit- Al_2O_3 pripravené metódou „Rapid solidification“, kedy rýchlosť chladenia je rádovo $10^6\text{ }^\circ\text{C s}^{-1}$.

Ľubomír Smrčok, Mariana Sládkovičová, Marian Kucharík

Experimentálne práce na neutrónovom zdroji v Hahn-Meitner Institute, Berlín (Smrčok, Kucharík, Sládkovičová) a na synchrotróne v Berlíne (Bessy) a v Grenobli (ESRF) (Smrčok, Kucharík)

Pozvané prednášky pracovníkov ústavu na zahraničnom pracovisku (mimo medzinárodných konferencií)

J. Bujdák: „Clay minerals in chemical evolution“, Institute of General, Inorganic and Theoretical Chemistry, Department of Theoretical Chemistry, University of Innsbruck, Austria. 12.11. 2007

D. Galusek: „Pre-ceramic precursors for bulk non-oxide ceramics and ceramic-ceramic composites“, University of Bayreuth, Bayreuth, Germany, 20.7.2007

M. Pentrák: „Acid treatment of clay minerals“, University of Poitiers, France, 30.11.2007

Dlhodobé pobyty pracovníkov ústavu realizované na základe získania štipendií na riešenie projektov

Jaroslav Sedláček

University of Karlsruhe, Karlsruhe, Nemecko, 09.2006–09.2008, dlhodobý pobyt ako štipendista v rámci **Mária Currie Fellowship**, aplikovaný výskum v oblasti prípravy nanokompozitov $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-SiC}$ z polymérnych prekurzorov

Matúš Milko

University of Leoben, Leoben, Rakúsko, 03.2007 – 01.2010, dlhodobý pobyt v Ústave fyziky materiálov, výpočty optických vlasností nanotrubičiek

Prednášky zahraničných pracovníkov, ktorí navštívili ÚACH SAV

Prof. Corneliu Balan: „Politehnica” University of Bucharest, Romania

„Rheology of sol-gel transition”

22. 02. 2007

Dr. Ivo Dlouhý: Ústav fyziky materiálov AV ČR, Brno

„Lomové chování kompozitních materiálů s křehkou maticí“

28. 02. 2007

Dr. Kiyoshi Hirao: High-performance component processing group, Advanced

Manufacturing Processing Research Institute, National Inst. Adv. Industrial Sci. and

Technology (AIST), Nagoya, Japan

„High thermal conductivity silicon nitride ceramics”

13. 03. 2007

Dr. Shelley Wiederhorn: National Institute of Standards and Technology Gaithersburg, MD, USA

„The effect of rare earth oxides on the creep of silicon nitride”

14. 06. 2007

Členstvo a funkcie v medzinárodných vedeckých spoločnostiach, úniách a národných komitétach SR

M. Drábik: International Union of Pure and Applied Chemistry, člen, národný reprezentant SR a člen Národného komitétu
The Institute of Materials (UK), doživotný člen
The World Innovation Foundation, člen
EuCheMS - člen divízie Inorganic Chemistry

D. Galusek: American Ceramic Society, člen
European Society on Glass and Technology, tajomník

M. Hnatko European Ceramic Society, člen

P. Komadel: AIPEA – člen výboru 2005-2009
The Clay Minerals Society, člen

Z. Lenčák American Ceramic Society, člen

	European Ceramic Society, člen Japan Ceramic Society, člen
M. Liška:	International Commission on Glass, zástupca SR
V. Malkin:	WATOC (World Assoc. of Theoretically Oriented Chemists), člen
J. Noga:	The International Society for Theoretical Chemical Physics, člen WATOC, člen
P. Šajgalík:	World Academy of Ceramics, volený člen American Ceramic Society, člen European Ceramic Society Council, člen Japan Ceramic Society, člen Materials Research Society, člen
M. Boča	Division of Fluorine chemistry – American Chemical Society
Z. Netriová	Division of Fluorine chemistry – American Chemical Society

Členstvo v redakčných radách časopisov v zahraničí

P. Komadel:	Clays and Clay Minerals Clay Minerals Applied Clay Science
M. Liška	Sklář a Keramik Ceramics-Silikáty
P. Šajgalík:	Ceramics-Silikáty Key Engineering Materials

Medzinárodné vedecké podujatia, ktoré ústav organizoval alebo sa na ich organizácii podieľal, s vyhodnotením vedeckého a spoločenského prínosu podujatia. Do tejto kategórie patria podujatia s aspoň 30 % zahraničných účastníkov.

Jesenná škola o rozptyle neutrónov, Tatranská Štrba, 15-18.9.2007. Prínosom podujatia bolo oboznámenie účastníkov s novými technikami založenými na neutrónovej difrakcii a spektroskopii.

59. zjazd českých a slovenských chemikov: (M. Drábik - člen Prípravného výboru, garant sekcie „Súťaž komentovaných postrov“)

21. Intl. Conference on Coordination and Bioinorganic Chemistry: (M. Drábik - člen organizačného výboru)

Engineering Ceramics 07, Smolenice, 6.-10. 5. 2007, hlavný organizátor prof. RNDr. P. Šajgalík, DrSc., Oddelenie keramiky ÚACH. Konferencie sa zúčastnilo 110 účastníkov z celého sveta.

Medzinárodné vedecké podujatia, ktoré usporiada ústav v r. 2008 (anglický a slovenský názov podujatia, miesto a termín konania, meno, telefónne číslo a e-mail zodpovedného pracovníka)

The 8th Conference on Solid State Chemistry - SSC 2008, 6.-11. 7. 2008, Bratislava
P. Komadel, uachkomp@savba.sk, 02/59410464

Počet pracovníkov v programových a organizačných výboroch medzinárodných konferencií.

10

Účasť expertov na hodnotení projektov RP, ESF, prípadne iných

P. Šajgalík:

- účasť na priebežných oponentúrach projektov v rámci Rady programu výskumu a vývoja: VYUŽÍVANIE DOMÁCICH SUROVÍN A ZDROJOV
- účasť na príprave výzvy programu výskumu a vývoja: ZVYŠOVANIE INOVAČNEJ VÝKONNOSTI SPOLOČNOSTI
- člen výberovej komisie DFG (German Research Society) pre program SPP1181: Nanoscale Inorganic Materials through Molecular Design

Medzinárodné ocenenia a iné informácie k medzinárodnej vedeckej spolupráci

V. Vedná politika

Orientácia výskumu vedeckých skupín ústavu zodpovedá nielen zriaďovacej listine, ale aj moderným trendom v oblasti anorganickej chémie a materiálového výskumu. V oblasti **základného výskumu** sú výsledky jednotlivých skupín takmer porovnateľné s európskymi pracoviskami podobného zamerania. Počet karentovaných časopiseckých publikácií na vedeckého pracovníka sa blíži k 2 za rok. Snahou je tento počet dosahovať ako štandard s tým, že impakt faktor časopisov, v ktorých publikujeme, musí byť zreteľne nad priemernou hodnotou IF danej vednej oblasti. Ďalšou, nemenej významnou oblasťou, je **orientovaný výskum** so zameraním na priemysel, ako domáci tak aj zahraničný. Okrem toho, že je to zvyčajne významný faktor pri získavaní mimorozpočtových zdrojov, významne ovplyvňuje kredit ústavu v povedomí domácej verejnosti. Tu však treba prísne rozlišovať medzi službami a orientovaným výskumom, dôraz je potrebné klásť na výskum, kde sa budú podporovať tie výsledky orientovaného výskumu, ktoré majú šancu byť patentované.

Základný výskum svojím vysokým domácim aj zahraničným kreditom by mal byť zárukou záujmu domácich aj zahraničných firiem o spoluprácu v oblasti orientovaného výskumu. Táto kredibilita by mala byť podporená aj účasťou pracovníkov ústavu na **výučbe na vysokých školách**. Len v tomto trojuholníku je možné dosiahnuť stabilnú európsku úroveň s účasťou vo všetkých významných projektoch v oblasti zamerania ústavu.

Vecná orientácia výskumu sa bude v najbližšom období koncentrovať na výskum a vývoj nanotechnológií so špeciálnym zameraním na nanomateriály. Prepojenie teoretického výskumu s experimentálnym je realitou a ukazuje sa stále viac perspektívnym. Budú podporované *ad hoc* riešiteľské tímy s takouto skladbou.

VI. Spolupráca s univerzitami a inými subjektmi v oblasti vedy a techniky v SR

1. Prehľad spolupracujúcich vysokých škôl (fakúlt) a výsledky spolupráce

(kap. II sú tieto výsledky uvedené iba v rámci najvýznamnejších výsledkov pracoviska, tu sa uvedú úhrnne v rozsahu podľa uváženia organizácie).

Trenčianska univerzita Alexandra Dubčeka v Trenčíne

Okrem spoločného pracoviska s TnU AD (Centrum kompetencie skla Vitrum Laugaritio) rieši ÚACH SAV v spolupráci s touto univerzitou 2 spoločné projekty VEGA 1/3578/06 a 2/6181/26, 2 projekty APVV (APVV 0485-06, APVT-20-P0640) a projekt aplikovaného výskumu AV 4/0025/07. Prof. RNDr. P. Šajgalík, DrSc. je členom vedeckej rady TnU AD. Doc. Ing. D. Galusek, PhD. je členom vedeckej rady ÚPHV TnU AD a prof. Ing. M. Liška, DrSc. je externým členom Vedeckej rady ÚACH.

Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU v Bratislave

V spolupráci s touto fakultou sa riešia viaceré spoločné projekty. Intenzívne sa využíva prístrojové vybavenie spoločných pracovísk (pozri III. 5.). Zamestnanci ústavu pravidelne vedú diplomantov z niekoľkých oddelení fakulty. V roku 2007 bol podaný spoločný APVV projekt. Prof. Ing. Pavel Fellner, DrSc. je externým členom Vedeckej rady ÚACH SAV.

Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského v Bratislave

V spolupráci s touto fakultou sa intenzívne využíva prístrojové vybavenie spoločných pracovísk (pozri III. 5.) a rieši sa spoločný projekt VEGA 2/6180 a spoločný termoanalytický výskum polyvanadičnanov. V roku 2007 boli podané 2 spoločné APVV projekty. Prof. RNDr. J. Noga, DrSc. a Ing. M. Janek, PhD. majú hlavné úväzky na fakulte a RNDr. M. Drábik, CSc. je členom Rigoróznej komisie na Katedre anorganickej chémie tejto fakulty. Prof. RNDr. J. Noga, DrSc. je externým členom Vedeckej rady ÚACH SAV.

Žilinská univerzita v Žiline

ÚACH rieši v spolupráci s Elektrotechnickou fakultou spoločný projekt APVV-0448-06: Keramické progresívne materiály foto-termicko-mechanickej konverznej sústavy solárneho tepelného motora na báze parného cyklu, ktorého zodpovedným spoluriešiteľom z univerzity je doc. Zdeněk Dostál, CSc.

Fakulta chemická VUT Brno, Česká republika

Prof. RNDr. P. Šajgalík, DrSc. je členom Vedeckej rady Fakulty chemickej VUT Brno. Ústav má s fakultou dlhodobú spoluprácu pri vedení diplomových prác. V roku 2007 pokračuje v doktorandskom štúdiu na ÚACH už tretí absolvent tejto fakulty, ktorý sa zároveň zúčastňuje na riešení aktuálnych APVV projektov ústavu.

Členstvo vo vedeckých radách VŠ a fakúlt

prof. RNDr. P. Šajgalík, DrSc.	Trenčianska univerzita Alexandra Dubčeka Ústav prírodných a humanitných vied TnU AD Fakulta chemická, VUT, Brno, ČR Hutnícka fakulta, TU Košice
prof. Ing. M. Liška, DrSc.	TnU AD, FPT TnU AD, VŠCHT Praha, ČR
doc. Ing. D. Galusek, PhD.	Ústav prírodných a humanitných vied TnU AD

2. Významné aplikácie výsledkov výskumu v spoločenskej praxi (pozn. ako k bodu 1.)

Pre **PC Ladce, a. s.** riešil ÚACH SAV projekt vedecko-technickej spolupráce „Použitelnosť cementov PC Ladce, a. s. pre syntézy MDF materiálov“, zodpovedný riešiteľ RNDr. M. Drábik, CSc. Projekt, zameraný na preverenie predpokladov vhodnosti jednotlivých cementov pre prípravu MDF materiálov, bol ukončený oponentúrou a odovzdaním Záverečnej správy

3. Úplný prehľad vyriešených problémov pre mimoakademické organizácie, s uvedením finančného efektu.

Pre **VÚEZ a.s., Levice** riešila VILA ako subkontraktor projekt zameraný na sledovanie koróznej odolnosti sklenených vlákien, ktorého zadávateľom je firma Alion Science, USA. V rámci projektu sa vyhodnotili a identifikovali mechanizmy rozpúšťania sklenených vlákien z tepelných izolácií jadrových elektrární v médiách používaných na dochladenie reaktorovej zóny v prípade havárie spojenej so stratou chladiva. Finančný efekt v roku 2007 -700 tis. Sk

4. Spoločné pracoviská s univerzitami

Sklárske centrum kompetencie VILA (Vitrum Laugaritio): V roku 2007 pokračovala činnosť Sklárskeho centra kompetencie Vitrum Laugaritio (skrátene VILA), spoločného pracoviska ÚACH SAV, **TnU AD** a RONA, a.s. Úlohou centra je stimulácia a rozvoj základného výskumu v oblastiach súvisiacich so sklom ako materiálom, jeho výrobou a zušľacht'ovaním, podpora rozvoja aplikovaného výskumu a vývoja v oblastiach súvisiacich s existujúcou priemyselnou základňou SR. Pracovníci centra sa podieľajú na pedagogickej činnosti, ktorá sa týka vysokoškolského štúdia v odbore „Chemická technológia skla a špeciálnych keramických materiálov“ a doktorandského štúdia v odbore „Anorganická technológia a materiály“. V rámci centra sa v roku 2007 podarilo na TnU AD získať akreditáciu pre inžinierske štúdium v študijnom programe „*Chémia a technológia skla a špeciálnych keramických materiálov*“ v študijnom odbore 5.2.18 „*Chemické technológie*“, garantom je prof. Liška. V roku 2007 získala TnU AD oprávnenie viesť habilitačné a inauguračné pokračovanie v študijnom odbore 5.2.19 „*Anorganické technológie a materiály*“, garantom je prof. Liška.

TnU AD zamestnáva v roku 2007 v Centre štyroch inžinierskych pracovníkov. Naďalej pokračovalo budovanie prístrojového portfólia pracoviska. Z grantových prostriedkov sa zakúpil nový termomechanický analyzátor a centrum získalo dar od Nadácie Alexandra von Humbolda – keramografickú leštičku Struers. Spoločne s TnU AD sa riešili dva granty VEGA (2/6181/26 a 1/3578/06), grant APVV 0485-06 a projekt aplikovaného výskumu AV 4/0025/07. Pokračovala spolupráca na riešení spoločného projektu APVT-20-P06405. Priamym výstupom spolupráce je viacero spoločných publikácií.

Pracovisko pre simultánnu TG-DTA analýzu: SDT 2960 T. A. Instruments. Prístroj má špičkové parametre pre termoanalytický výskum materiálov do teploty 1500 °C. Popri pracovníkoch ÚACH ho využívajú na základe dohody pracovníci **FCHPT STU, PríF UK** a **ÚSTARCH SAV** pre riešenie úloh základného výskumu, ako aj pre pedagogické účely. Vedecké výsledky získané využitím tohto prístroja boli v roku 2007 predmetom viacerých spoločných publikácií a prednášok na medzinárodných a domácich konferenciách.

Spoločné pracovisko FTIR spektroskopie: FTIR spektrometer Nicolet Magna 750, využívajú zamestnanci partnerských pracovísk ÚACH SAV, CHÚ SAV, **FCHPT STU** a **PríF UK**. Prístroj slúži pre potreby základného výskumu a pre pedagogické účely jednotlivých užívateľov, pričom každý partner rieši svoje vlastné úlohy.

Pracovisko s vysokorozlišovacím rtg. práškovým difraktometrom: STOE STADI-P. Partneri dohody o vytvorení tohto pracoviska sú: **FCHPT STU**, **PríF UK** a **ÚACH SAV**. Prístroj sa využíva hlavne na merania veľmi malých množstiev vzoriek a na získavanie dát určených na stanovenie mriežkových parametrov alebo spresňovanie kryštálových štruktúr.

VII. Spolupráca s aplikačnou a hospodárskou sférou

(Spoločné pracoviská, výsledky spolupráce)

V roku 2003 bolo podpísom zmluvy o zriadení **Centra kompetencie skla Vitrum Laugaricio** zriadené spoločné pracovisko, kde skláreň RONA, a.s., Lednické Rovne vystupuje ako zástupca priemyselnej sféry. V spolupráci s RONA, a.s. rieši VILA spoločný projekt AV 4/0025/07 zameraný na simuláciu a hodnotenie pnutí pri tvarovaní a chladení sklárskych výrobkov. VILA participuje aj na štátnej úlohe výskumu a vývoja „Realizácia vynikajúcich projektov na podporu profesionálneho rastu mladých zamestnancov výskumu a vývoja“ v rámci tematického štátneho programu výskumu a vývoja „Rozvoj osobnosti a talentu mladých zamestnancov a doktorandov výskumu a vývoja do 35 rokov“.

V spolupráci s firmou Johns Manville Slovakia rieši pracovisko projekt APVT-20-P06405: Optimalizácia tavenia skloviny EUTAL.

GoldenSUN Slovakia, s.r.o.

ÚACH rieši v spolupráci s firmou GoldenSUN v Liptovskom Mikuláši spoločný APVV projekt (APVV-0448-06) s názvom „Keramické progresívne materiály foto-termicko-mechanickej konverznej sústavy solárneho tepelného motora na báze parného cyklu“.

VIII. Aktivity pre vládu SR, Národnú radu SR, ústredné orgány štátnej správy SR a iné organizácie

Prehľad aktuálnych spoločenských problémov, ktoré riešilo pracovisko v spolupráci s Kanceláriou prezidenta SR, s vládnyimi a parlamentnými orgánmi alebo pre ich potrebu

Členstvo v poradných zborech vlády SR, Národnej rady SR, ministerstiev SR a pod.

- | | |
|--------------------|--|
| J. Noga | Pracovná skupina pre chémiu a chemickú technológiu Akreditačnej komisie SR (poradný orgán Vlády SR) – člen |
| P. Šajgalík | Komisia pre oceňovanie (poradný orgán ministra školstva) - člen |
| J. Bujdák | Externý člen komisie Úradu pre verejné obstarávanie pre námietky pri verejnom obstarávaní |

D. Galusek Externý člen komisie Úradu pre verejné obstarávanie pre námietky pri verejnom obstarávaní

Expertízna činnosť a iné služby pre štátnu správu a samosprávy

J. Bujdák Spoluautor úloh Chemickej olympiády v skupine C

S. Kedžuch Spoluautor úloh Chemickej olympiády v skupine F a člen krajskej komisie CHO

Členstvo v radách štátnych programov a podprogramov ŠPVV a ŠO

P. Šajgalík Člen Rady programu výskumu a vývoja: VYUŽÍVANIE DOMÁCICH SUROVÍN A ZDROJOV

P. Šajgalík Člen Rady programu výskumu a vývoja: ZVYŠOVANIE INOVAČNEJ VÝKONNOSTI SPOLOČNOSTI

Členstvo v orgánoch APVV

P. Komadel Člen Rady pre prírodné vedy a predseda pracovnej skupiny pre chémiu

P. Šajgalík Člen rady pre medzinárodnú vedecko-technickú spoluprácu
Člen rady pre podporu projektov 7. RP EÚ

IX. Vedecko-organizačné a popularizačné aktivity; ceny a vyznamenania

Vedecko-popularizačná činnosť (počet knižných publikácií, prednášok, príspevkov v tlači, rozhlase, televízii a pod.)

Vystúpenia v TV

P. Šajgalík, TA3, 02.04.2007. reportáž: Pavol Šajgalík sa stal Vedcom roka 2006

P. Šajgalík, rozhovor v TA3, 02.04.2007.

http://www.ta3.com/sk/reportaze/31925_rozhovor-s-vedcom-roka-2006-profesorom-pavlom-sajglikom

P. Šajgalík, reportáž v Slovenskej televízii, Správy 12.04.2007, udelenie titulu Vedec roka

Vystúpenia v rozhlase

P. Šajgalík, rádio Regina SRo, rozhovor s Vedcom roka 2006, 02.04.2007

P. Šajgalík bol v Košiciach habilitovaný za docenta, CASSOVIA.sk, 25. 05. 2007,
<http://www.cassovia.sk/newsread.php?newsid=12329>

P. Šajgalík: Z prvej ruky – portrét, relácia SRo 1, 19.07.2007

P. Šajgalík: Portrét, Radio Regina 02.12.2007,
<http://www.rozhlas.sk/inetportal/2007/index.php?lang=1&stationID=4&page=showRelacia&id=341>

P. Šajgalík, Nočná pyramída, SRo, 27.12.2007

Príspevky v tlači

M. Korenko, *K&S (Knihy a spoločnosť)*, 7-8, 2007, Alchymia chémie

M. Korenko, *Quark*, 6, 2007, Chémia - najrozšírenejšia veda

M. Drábik – ChemZi - časopis/bulletin Slovenskej chemickej spoločnosti pri SAV, „Program a priebeh série prednášok Chemické horizonty“

P. Šajgalík, Z. Lenčoš, M. Balog, *Hospodárske noviny*, 22. 1. 2007, Veda chce vidieť 30 rokov dopredu

P. Šajgalík, *Pravda*, 05.04.2007, Nedôvera k vede má hlboké korene

P. Šajgalík, *Hospodárske noviny*, 18.10.2007, Nie chaos, ale snaha o prežitie

P. Šajgalík, *SME* 10.05.2007, Robiť s Japoncami je úžasné

P. Šajgalík, *Quark* 6, jún 2007, str. 8, Veda musí byť v predstihu

P. Šajgalík, *TelePlus* 12, 2007, str. 24, Sú naši vedci ohrozeným druhom?

P. Šajgalík, *Nová éra* 2, 12. 04. 2007, Aj veda môže byť dobrý biznis

P. Šajgalík, *Železničné ozveny* 5, 2007, Keramika vhodná aj pre železnice

P. Šajgalík, Z. Lenčoš, M. Balog, *Správy SAV* 4, 2007, str. 10, Čo priniesli výsledky projektu SMART – trendy v materiálovom výskume

P. Šajgalík, *EUROREPORT plus*, Slovenský vedec – blázon či exotická bytosť?, júl-august 2007, str. 31 – rozhovor

P. Šajgalík: *Profit* 21, 17.10.2007, str. 66-68: súčasť článku: Nanoponožky a iné šibalstvá

P. Šajgalík: *Revue Priemyslu* č. 11, november 2007: Spoločná reč, str. 70 -71

P. Šajgalík, *VISIONS* 4/2007, interview: Strach túžbu po poznání nezastaví

Popularizačné prednášky

S. Komorovský: „Príbeh o vzniku a zjednotení fyziky“, Sústreďenie najlepších riešiteľov stredoškolského Fyzikálneho korešpondenčného seminára (FKS) , Terchová, 14.–20.01.2007

M. Derzsi: „Molecular spectroscopy with neutrons“, Jesenná škola o rozptyle neutrónov, Tatranská Štrba, 15.-18. 9. 2007. Prínosom podujatia bolo oboznámenie účastníkov s novými technikami založenými na netrónovej difrakcii a spektroskopii.

M. Liška: spoluúčasť na **organizácii Sklárskej školy stredoškolákov** v Lednických Rovniach 20.-21.9.2007

M. Liška: prednáška na Sklárskej škole stredoškolákov v Lednických Rovniach „Virtuálne fyzikálne a chemické laboratórium“

D. Galusek: prednáška na Sklárskej škole stredoškolákov v Lednických Rovniach „Čo je keramika: Neznámy svet materiálov“

M. Liška: prednáška na tému „Sklárske laboratórium“ na Gymnáziu sv. Dona Bosca v Novej Dubnici

D. Galusek: prednáška na tému „Keramika ako ju nepoznáme“ na Gymnáziu sv. Dona Bosca v Novej Dubnici

Usporiadanie domácich vedeckých podujatí (vrátane kurzov a škôl), s uvedením názvu podujatia, dátumu, miesta konania a počtu účastníkov

- K životnému jubileu doc. Ing. Dr. F. Hanica, DrSc. (80) bol usporiadaný seminár, na ktorom sa zúčastnilo asi 40 účastníkov z Českej a Slovenskej republiky. Pozvané prednášky predniesli ôsmi prednášajúci z oboch republík. Seminár sa konal 29.11.2007.
- Oddelenie teoretickej chémie ÚACH SAV usporiadalo 14. 11 2007 odborno-spomienkový seminár pri príležitosti nedeľných 60. narodenín doc. Ing. Ladislava Turi Nagya, CSc. V rámci seminára odznelo osem pozvaných prednášok z oblasti chemickej fyziky, ktorými si bývalí blízki spolupracovníci pripomenuli život a prácu dlhoročného vedúceho Oddelenia teoretickej chémie, bývalého predsedu Vedeckej rady ÚACH, kolegu, školiteľa a neúnavného propagátora počítačových metód v chémii.

Členstvo v organizačných výboroch domácich vedeckých podujatí, s uvedením názvu podujatia, dátumu a miesta konania

Domáce vyznamenania a ceny za vedeckú a inú činnosť a iné dôležité informácie k vedecko-organizačným a popularizačným aktivitám (uviesť konkrétne)

Získaný podporný fond Štefana Schwarza

Ing. V. Petrušková, PhD.

Volení členovia Učenej spoločnosti SAV

prof. RNDr. Jozef Noga, DrSc.
prof. RNDr. Pavol Šajgalík, DrSc.

Členstvo v redakčných radách domácich časopisov

M. Boča Chemical Papers – Associate editor
P. Komadel Geologica Carpathica

Činnosť v domáciach, resp. v česko-slovenských vedeckých spoločnostiach

Slovenská chemická spoločnosť

M. Drábik podpredseda SCHS (od 1. 4. 2007), predseda OS Anorganická chémia
 (do 30.09.2007) Slovenská chemická spoločnosť pri SAV
P. Komadel člen výboru Odbornej skupiny anorganická chémia
M. Korenko predseda OS Anorganická chémia (od 30. 9. 2007)

Humboldtov klub v SR

J. Noga člen
P. Šajgalík člen
Z. Lenčéš člen
M. Boča člen

Slovenská akademická spoločnosť

J. Noga volený člen

Slovenská ílová spoločnosť

P. Komadel predseda
J. Madejová členka výboru

Slovenská silikátová VTS

P. Šajgalík predseda
Z. Lenčéš tajomník pre Európsku keramickú spoločnosť
A. Jurová tajomník

Slovenská sklárska spoločnosť

M. Liška podpredseda
D. Galusek člen predstavenstva
P. Šajgalík člen predstavenstva

Účasť na výstavách a jej zhodnotenie

S. Balkovic, M. Drábik - CONECO 2007, dve vedecké informácie v rámci prezentácie SAV:
„Poškodenie stavebných konštrukcií síranmi“ a „Použitelnosť portlandských cementov pre syntézy MDF materiálov“

X. Činnosť knižnično-informačného pracoviska

Knižnica ÚACH SAV mala v roku 2007 jednu pracovníčku na plný úväzok.

Knižnica zabezpečuje:

- výpožičky z fondov knižnice ÚACH SAV pre pracovníkov ústavu a pracovníkov v areáli SAV, ktoré sú asi 4 denne,
- výpožičky pre mimoakademických užívateľov z fondu knižnice. Prezenčné výpožičky sa neeviduujú, absenčných bolo 60,
- výpožičky prostredníctvom medziknižničnej výpožičnej služby v rámci SR, prípadne prostredníctvom medzinárodnej medziknižničnej výpožičnej služby - 80 ročne,
- xerokópie z Ústrednej knižnice SAV,
- evidenciu a spracovanie publikačnej činnosti pracovníkov ústavu prostredníctvom databázy ARL,
- spracovanie údajov o citáciách z databáz Web of Science,
- počítačové spracovanie knižničného fondu.

V roku 2007

- mala knižnica 56 prírastkov kníh,
- do knižnice dochádzalo 8 titulov periodík,
- celkový počet titulov časopisov v knižnici je 108,
- počet knižných titulov je 7351,
- počet dizertácií je 167.

XI. Aktivity v orgánoch SAV

Členstvo vo vedeckých kolégiách SAV

J. Noga	predseda Vedeckého kolégia SAV pre chemické vedy
P. Šajgalík	člen Vedeckého kolégia SAV pre chemické vedy
P. Komadel	člen Vedeckého kolégia SAV pre chemické vedy člen Vedeckého kolégia SAV pre elektroniku, materiálový výskum a technológie

Členstvo vo výbore Snemu SAV

Členstvo v komisiách Predsedníctva SAV

M. Drábik:	člen Komisie SAV pre duševné vlastníctvo
P. Šajgalík	člen Komisie pre udeľovanie štipendií zo Schwarzovho fondu
J. Noga	člen Akreditačnej komisie SAV

Členstvo v orgánoch VEGA

J. Bujdák	člen komisie VEGA č. 11, pre chemické vedy
D. Galusek	člen komisie VEGA č. 5, pre strojárstvo, hutníctvo a materiálové inžinierstvo
M. Liška	člen komisie VEGA č. 11, pre chemické vedy
V. Malkin	člen komisie VEGA č. 11, pre chemické vedy

XII. Hospodárenie organizácie

Rozpočtové a príspevkové organizácie SAV

Rozpočtové organizácie SAV

Výdavky RO SAV

v tis. Sk

Kategória	Posledný upravený rozpočet r. 2007	Čerpanie k 31.12.2007 celkom	z toho:	
			z rozpočtu	z mimoroz. zdrojov
Výdavky celkom	30 369	53 138	30 338	22 800
z toho:				
- kapitálové výdavky	497	4 291	497	3 794
- bežné výdavky	29 872	48 847	29 841	19 006
z toho:				
- mzdové výdavky	18 527*	19 772	18 527	1 245
odvody do poisťovní a NÚP	6 341	6 749	6 317	432
- tovary a ďalšie služby	5 004	22 326	4 997	17 329
z toho:				
výdavky na projekty (VEGA, APVV, ŠO, ŠPVV, MVTP, ESF)	3 805	26 605	3 805	22 800
výdavky na periodickú tlač	0	0	0	0
transfery na vedeckú výchovu	1 542	1 827	1 542	285

*** vrátane štipendií doktorandov**

Príjmy RO SAV

v tis. Sk

Kategória	Posledný upravený rozpočet r. 2007	Plnenie k 31.12.2007
Príjmy celkom:	232	23 090
z toho:		
rozpočtované príjmy (účet 19)	232	232
z toho:		
- príjmy za nájomné	214	213
mimorozpočtové príjmy (účet 780)		22 858

XIII. Nadácie a fondy pri pracovisku

XIV. Iné významné činnosti pracoviska

XV. Vyznamenania, ocenenia a ceny udelené pracovníkom organizácie v roku 2007 (mimo SAV)

P. Šajgalík:

- Strieborná medaila Maximiliána Hella, Trenčianska univerzita Alexandra Dubčeka v Trenčíne
- Ocenenie za prínos pre rast produktivity v rokoch 1998-2007, kategória jednotliviec, Ministerstvo hospodárstva SR
- Vedec roka 2006, Zväz vedeckých novinárov

S. Kedžuch: Ocenenie „Študentská osobnosť Slovenska 2006/2007, kategória Prírodné vedy, chémia“, udeľuje organizácia *Junior Chamber International – Slovakia* (pod záštitou prezidenta republiky Ivana Gašparoviča, s podporou Slovenskej rektorskej konferencie a pod odbornou garanciou SAV)

P. Hrobárik: „*The Best Poster*” Award. 11th International Conference on Chemistry and Environment; Toruń, Poland (9th-12th September, 2007). Poster: P. Hrobárik, R. Reviakine, A. V. Arbuznikov, O. L. Malkina, V. G. Malkin, F. H. Köhler, M. Kaupp: *Density Functional Calculations of NMR Shielding Tensors for Paramagnetic Systems with Arbitrary Spin Multiplicity. Validation on 3d metallocenes.*

M. Korenko: 3. miesto v súťaži posterov na konferencii 59. Zjazd Chemikov, Tatranské Matliare, 2007. Poster: M. Korenko: „Interfacial Tension between Aluminum and Cryolite Melts during Electrolysis of the System Na₃AlF₆-AlF₃(NaF)-Al₂O₃“

XVI. Poskytovanie informácií v súlade so zákonom č. 211/2000 Z. z. o slobodnom prístupe k informáciám v znení neskorších predpisov (Zákon o slobode informácií)

XVII. Problémy a podnety pre činnosť SAV

Rozpočtované prostriedky na réžiu ústavu sú trvalo na úrovni 25 – 35 % potreby. Tento fakt núti vedenie ústavu používať aj grantové prostriedky na chod inštitúcie. Často krát je takýto postup na hranici možností zmlúv uzatvorených medzi riešiteľom, ústavom a poskytovateľom grantových prostriedkov. Tento stav je dlhodobo neudržateľný a potrebuje koncepčné riešenie, ktoré môže poskytnúť iba P SAV, ktoré je správcom rozpočtovej kapitoly SAV.

Zvyšovanie kvalifikačnej štruktúry ústavu vytvára tlak na mzdový fond. Keďže mzdový fond rastie pomaly, ústav sa paradoxne dostáva do stavu, keď musí nivelizovať požiadavky na excelentnosť svojich zamestnancov postupným znižovaním netarifnej zložky plátov. Tento stav je neúnosný aj vzhľadom na fakt, že pri snahe interne riešiť tento problém znížením

počtu zamestnancov poberajúcich plat, donedávna nebolo garantované zachovanie mzdového fondu ústavu. Dokonca ani prisľúbené zvýhodnenie o 4 % mzdového fondu pre ústavy hodnotené v akreditácii stupňom A* na rok 2008 neodstráni tento problém. V tejto súvislosti sa zdá byť asymetria v možnosti čerpať mzdové prostriedky z projektov APVV medzi príspevkovými a rozpočtovými inštitúciami ešte neudržateľnejšia.

Ďalší problém, ktorý vyžaduje riešenie, súvisí s možnosťou získať investičné prostriedky z projektov APVV. Túto možnosť pochopiteľne vítame. Pravidlá získavania týchto prostriedkov určujú, že APVV poskytne len taký diel investičných prostriedkov, ktorý zodpovedá alikvotnej časti ceny prístroja prislúchajúcej na dobu riešenia projektu. Teda na prístroj s dobou odpisovania 6 rokov je možné v projekte trvajúcom 3 roky získať „iba“ 50 % prostriedkov. Navyše za prístroj zakúpený aj tesne pred začatím projektu nie je možné získať nijakú časť jeho ceny, ani ak sa intenzívne používa na riešenie projektu. Predovšetkým rozpočtové inštitúcie SAV majú vážny problém naakumulovať dostatočné množstvo investičných prostriedkov, aby mohli účinne využívať tento nástroj na kvalitatívne zlepšenie svojho prístrojového parku. Za zváženie stojí vytvorenie pôžičkovej banky na úrovni P SAV, ktorá by pomohla ústavom preklenúť problémy pri nákupe prístrojov z prostriedkov APVV. Navyše P SAV by malo deklarovat požiadavku na APVV, aby umožnila riešiteľom v nasledujúcom úspešnom projekte žiadať prostriedky na dofinancovanie prístroja (ak je pre projekt potrebný). Tak by vznikol predpoklad na získanie zdrojov, ktoré by sa vrátili do pôžičkovej banky SAV.

Správu o činnosti organizácie SAV spracovala: RNDr. Jana Madejová, DrSc., 5941 0406

Príloha č. 1

Menný zoznam pracovníkov k 31. 12. 2007

Vedúci vedeckí pracovníci DrSc. 7

Meno, titul	Úväzok/%	hod/rok
Komadel Peter, RNDr. DrSc.	HPP/100	2000
Liška Marek, prof. Ing. DrSc.	ČÚ/45	900
Madejová Jana, RNDr. DrSc.	HPP/100	2000
Malkin Vladimír, prom. fyz. DrSc.	HPP/100	2000
Malkin Oľga, DrSc.	HPP/100	2000
Noga Jozef, prof. RNDr. DrSc.	ČÚ/66	1320
Šajgalík Pavol, prof. RNDr. DrSc.	HPP/100	2000

Samostatní vedeckí pracovníci CSc., PhD. 15

Meno, titul	Úväzok/%	Hod/rok
Benco Ľubomír, Ing. CSc.	ČÚ/10	200
Boča Miroslav, Ing. PhD.	HPP/100	2000
Bujdák Juraj, RNDr. Dr.	HPP/100	2000
Drábik Milan, RNDr. CSc.	HPP/100	2000
Galusek Dušan, doc. Ing. Dr.	HPP/100	2000
Hnatko Miroslav, Ing. PhD.	HPP/100	2000
Janek Marián, Ing. PhD.	ČÚ/20	400
Kavecký Štefan, Ing. CSc.	ČÚ/33	660
Kosa Ladislav, Ing. CSc.	HPP/70	1400
Lenčes Zoltán, Ing. PhD.	HPP/100	2000
Mach Pavol, doc. Ing. CSc.	ČÚ/25	500
Nerád Ivan, Ing. CSc.	HPP/100	2000
Smrčok Ľubomír, RNDr. CSc.	HPP/100	2000
Scholtzová Eva, Ing. CSc.	HPP/100	2000
Tunega Daniel, Ing. CSc.	ČÚ/10	200

Ostatní vedeckí pracovníci CSc., PhD. 19

Meno, titul	Úväzok/%	Hod/rok
Balkovic Svetozár, Ing. CSc.	HPP/100	2000
Czímerová Adriana, Mg. PhD.	HPP/100	2000
Derzsi Mariana, Mgr., PhD.	HPP/100	2000
Ghillányová Katarína, Ing. PhD.	HPP/50	1000
Chromčíková Mária, Ing. PhD.	HPP/100	2000
Jankovič Ľuboš, Mgr. PhD.	HPP/100	2000
Kedžuch Stanislav, Mgr.	HPP/100	2000
Korenko Michal, Ing. PhD.	HPP/100	2000
Kubíková Blanka, Ing. PhD.	HPP/100	2000

Kucharík Marián, Ing. PhD.	HPP/100	2000
Lichvár Peter, Ing. PhD.	HPP/100	2000
Milko Matúš, Ing. PhD.	HPP/100	0
Mlynáriková Jarmila, Ing. PhD.	HPP/100	0
Páľková Helena, Ing. PhD.	HPP/100	1660
Petrušková Viera, Ing., PhD.	HPP/100	660
Sedláček Jaroslav, Ing. PhD.	HPP/100	0
Šimko František, Ing. PhD.	HPP/100	2000
Švančárek Peter, Mgr. PhD.	HPP/100	2000
Valúchová Jana, Ing. PhD.	HPP/100	2000
Varga Štefan, Ing. CSc.	HPP/100	2000

Odborní pracovníci VŠ 15

Meno, titul	Úväzok/%	Hod/rok
Andrejkovičová Slávka, Mgr.	HPP/100	2000
Čeklovský Alexander, Mgr.	HPP/100	2000
Gáliková Ľubica, prom. farm.	HPP/100	2000
Hrachová Jana, RNDr.	HPP/100	2000
Hrnčiarová Klára, RNDr.	HPP/40	800
Hrobárik Peter, Mgr.	HPP/100	2000
Lilová Judita, Ing.	HPP/75	-
Lojanová Štefánia, Ing.	HPP/100	2000
Macková Iveta, Ing.	HPP/100	2000
Mikšíková Eva, Ing.	HPP/100	2000
Plachký Tomáš, Ing.	HPP/100	500
Piško, Ján, Ing.	HPP/100	-
Priščák Jozef, Ing.	HPP/100	2000
Repiský Michal, Mgr.	HPP/100	2000
Vasiljev Roman, RNDr.	HPP/100	2000

Odborní pracovníci ÚSV 13

Meno	Úväzok/%	Hod/rok
Baďura Miroslav	ČÚ/20	-
Bouadjenak Iveta	HPP/100	-
Dankovičová Jaromíra	HPP/100	-
Heinleinová Jarmila	HPP/100	2000
Hnatková Miroslava	HPP/100	2000
Jurová Anna	HPP/100	2000
Kapišinská Zdenka	HPP/100	-
Kňazovičová Magdaléna	HPP/100	2000
Kovářová Anna	HPP/100	-
Lukáčová Zora	HPP/100	2000
Rosíková Zuzana	HPP/100	2000
Sitár Jozef	HPP/100	-
Tonkovičová Alexandra	HPP/100	-

Doktorandi 8

Meno, titul	Úväzok/ %	Hod/rok
Frajkorová Františka, Ing.	HPP/100	500
Hric Ľubomír, Mgr.	HPP/100	2000
Chovanec Jozef, Ing.	HPP/100	500
Kipsová Linda, Ing.	HPP/100	2000
Komorovský Stanislav, Mgr.	HPP/100	2000
Netriová Zuzana, Ing.	HPP/100	2000
Mikoczyová Monika, Ing.	HPP/100	2000
Pentrák Martin, Ing.	HPP/100	2000

Ostatní 8

Meno, titul	Úväzok/%	Hod./rok
Boča Miroslav, Ing. PhD.	CÚ/25	-
Dankovičová Jaromíra	ČU/25	-
Kňazovičová Magdaléna	ČU/25	-
Mikoczyová Monika, Ing.	ČU/25	-
Maraffko Ján	HPP/100	-
Matejkinová Dana	HPP/100	-
Pírová Terezia	HPP/100	-
Rusnák Jaroslav, Ing.	ČU/33	-

HPP - hlavný pracovný pomer

ČU - čiastočný úväzok

Príloha č. 2

Projekty riešené na pracovisku

Domáce projekty

Vedecké projekty, ktoré boli v r. 2007 financované VEGA

1. **Fyzikálno-chemické vlastnosti** vrstevnatých silikátov z hľadiska ich environmentálnych aplikácií (Physical and chemical properties of layer silicates related to their environmental applications) RNDr. P. Komadel, DrSc., 01/2006 – 12/2008, ev. č. 2/6177/06, financuje SAV (VEGA) zo štátneho rozpočtu, 311 000 Sk.

Dosiahnuté výsledky: Publikácie v Prílohe 3: ADCA: 36, AFG: 29.

2. **Supramolekulové systémy** na báze molekulových agregátov organických farbív na povrchu vrstevnatých kremičitanov (Supramolecular assemblies based on the molecular aggregates of organic dyes on the surface of layered silicates), RNDr. J. Bujdák, PhD. 01/2006-12/2008, ev. č. 2/6180/26, jeden spoluriešiteľ, financuje SAV (VEGA) zo štátneho rozpočtu, 141 000 Sk.

Dosiahnuté výsledky:

Zhodnotil sa vplyv parametrov vrstevnatých kremičitanov na tvorbu molekulových agregátov farbív. Okrem náboja vrstiev, významný vplyv majú vlastnosti pôvodných vymeniteľných kationov na povrchu anorganického substrátu. Z hľadiska molekulovej štruktúry farbiva, významnú úlohu zohráva štruktúra heteroaromatického skeletu, prítomnosť objemných substituentov a štruktúra skupín, ktoré sú nosičmi kladného náboja.

Publikácie v Prílohe 3: ADCA: 36, AFG: 2, 3, 38

3. **Chemizmus a vybrané technologické dôsledky účinkov vlhkosti a síranov v materiáloch na báze cementu** (Chemistry and selected technological consequences of the effects of moisture and sulfates in cement-based materials), RNDr. M. Drábik, CSc., 1/2005 – 12/2007, ev. č. 2/5011/25, 2 riešiteľské organizácie, financuje SAV (VEGA) zo štátneho rozpočtu, 125 000 Sk.

Dosiahnuté výsledky:

1. Analýza a model vzťahu sieťovania vs. hydratácie v priebehu MDF syntéz.
2. Možnosti výroby pórobetónu z fluidného popolčeka – vstupné štúdium.

Publikácie v Prílohe 3: ADCA: 9, AEC: 1, AFC 6,7

4. **Keramické kompozity s netradičnými spekáciami a mikroštruktúru ovplyvňujúcimi prísadami** (**Ceramic composites with uncommon** sintering and microstructure forming additives), Ing. Z. Lenčéš, PhD. 01/2007 – 12/2009 ev. č. 2/7171/27, financuje SAV (VEGA) zo štátneho rozpočtu, 359 000,-Sk.

Dosiahnuté výsledky:

Bola zvládnutá príprava hutných vzoriek s prídavkami spekania odvodenými z organometalických polymérnych prekursorov.

Publikácie v Prílohe 3: ADCA: 10, 35, ADCB: 1, 2, 3, AFDA: 1

5. **Správanie sa nečistôt v priemyselných kyslých elektrolytoch na výrobu hliníka** (The behaviour of impurities in industrial acid electrolytes for aluminium production.) Ing. F.

Šimko, PhD., 01/2007 – 12/2009, ev.č. 2/7077/27, financuje SAV (VEGA) zo štátneho rozpočtu – 110 000 Sk.

Dosiahnuté výsledky: Publikácia v Prílohe 3: ADCA: 50, ADDA: 2, a AFG: 37

6. **Štúdium fluoridových taveninových sústav s potenciálom pre priemyselné využitie** (The study of the fluoride molten-salts systems with the potential for industrial application.), Ing. M. Boča, PhD., 01/2006 – 12/2008, ev.č. 2/6179/26, financuje SAV (VEGA) zo štátneho rozpočtu, 200 000 Sk.

Dosiahnuté výsledky: Publikácie v Prílohe 3: ADCA:2, 29, AEC 3

7. **Štúdium štruktúry a dynamiky vodíkových väzieb v tuhých látkach neutrónovou difrakciou, metódami kvantovej chémie a neelastickou neutrónovou spektroskopiou (INS)** (Structure and dynamics of hydrogen bonds in solids by neutron diffraction, quantum chemistry and inelastic neutron scattering (INS)). RNDr. Ľ. Smrčok, CSc., 01/2006 - 12/2008, ev. č. 2/6178/26, financuje VEGA zo štátneho rozpočtu, 95 000 Sk.

Dosiahnuté výsledky: Publikácie v Prílohe 3: ADCA: 31-34, 45-48 a AFG 33,34,35

8. **Smerom k detailnému poznaniu elektrónovej štruktúry z kvantovo-chemických výpočtov** (Towards detailed knowledge of electronic structure from quantum chemical calculation) O. Malkin, DrSc., 01/2006 - 12/2008, ev. č. VEGA - 2/6182/26, financuje VEGA zo štátneho rozpočtu, 340 000 Sk.

Dosiahnuté výsledky: Publikácie v Prílohe 3: ADCA: 18 a AFG: 14, 15

9. **Transparentné materiály na báze Al_2O_3 s výnimočnými mechanickými vlastnosťami** (Transparent alumina-based materials with outstanding mechanical properties), doc. Ing. D. Galusek, PhD., 01/2006-12/2008, ev. č. 2/6181/26, nositeľ projektu: ÚACH SAV, 1 spoluriešiteľ: TnU AD, financuje SAV (VEGA) zo štátneho rozpočtu, 146 000 Sk.

Dosiahnuté výsledky:

1. Vývoj experimentálneho zariadenia na plameňovú syntézu sklenených mikroguličiek v ťažko tavitelných systémoch s vysokým sklonom ku kryštalizácii.
2. Príprava sklenených mikroguličiek v systéme $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-Y}_2\text{O}_3$.

Publikácie v Prílohe 3: ADCA: 1, 3, 13, 14, 35 a AFC: 5

10. **Štruktúra a vlastnosti kremičitanových skiel – termodynamické modely a molekulovodynamické simulácie verzus experiment** (Structure and properties of silicate glasses – thermodynamical models and molecular dynamics simulations vs. experiment), prof. Ing. M. Liška, DrSc., 01/2006-12/2008, VEGA 1/3578/06, nositeľ projektu: TnU AD, spoluriešiteľ: doc. Ing. D. Galusek, PhD., ÚACH SAV, financuje SAV (VEGA) zo štátneho rozpočtu, 64 000 Sk.

Dosiahnuté výsledky:

Vypracovanie termodynamického modelu skiel sústavy $\text{CaO-Al}_2\text{O}_3$ a jeho verifikácia porovnaním so štruktúrou získanou výpočtom metódou kvantovej molekulovej dynamiky.

Publikácie v Prílohe 3: ADCA: 21, 25, 37, 40, AFC: 2, 3, 4

Vedecké projekty, ktoré boli v roku 2007 financované APVT alebo APVV

1. **Fyzikálno-chemické a termodynamické vlastnosti priemyselne dôležitých fluoridových tavenín na báze hliníka, nióbu a tantalu** (The physico-chemical and thermodynamic properties of the industrial molten fluoride systems on the base of

aluminium, niobium and tantalum), Ing. M. Korenko, PhD., 01/2005-12/2007, ev. č. APVT-51-008104, 2 spoluriešiteľské inštitúcie, financuje MŠ - APVV zo štátneho rozpočtu, 950 000 Sk.

Dosiahnuté výsledky: Publikácie v Prílohe 3: ADCA:2, 26, 28, 29, 41, 50, ADDA 2, 3

2. **Organické modifikácie prírodných nanomateriálov** (Organic modifications of natural nanomaterials), RNDr. P. Komadel, DrSc., 05/2006 – 04/2009, ev. č. APVV-51-050505, 2 spoluriešiteľské inštitúcie, financuje APVV zo štátneho rozpočtu, 2 470 000Sk (z toho 1 190 000 Sk pre spoluriešiteľské organizácie)

Dosiahnuté výsledky: Publikácie v Prílohe 3: ADCA: 15, 16, 32

3. **Anizotropný prenos energie v hybridných nanomateriáloch vrstevnatých kremičitanov s organickými farbivami** (Anisotropical energy transfer in hybrid nanomaterials based on layered silicates with organic dyes), RNDr. J. Bujdák, PhD., 05/2006-04/2009, ev. č. APVV-51-027405, dvaja spoluriešitelia zo zahraničia (Česká republika, Japonsko), jeden spoluriešiteľ zo SR, financuje APVV zo štátneho rozpočtu, 1 112 000 Sk, z toho 112 000 Sk pre spoluriešiteľa.

Dosiahnuté výsledky:

Rozpracovali sme prípravu materiálov na báze systémov vrstevnatých kremičitanov na prenos energie z molekúl rhodamínov na oxazínové farbivo. Príprava materiálov s fluorescenčnými vlastnosťami na báze hydrotalcitov s aniónovým porfyrínovým farbivom a štúdium antimikrobiálnej aktivity metylénovej modrej v koloidoch montmorillonitu.

Publikácie v Prílohe 3: ADCA: 4-7 AFG: 1, 4, 5, 17

4. **K lepšej presnosti v relativistických výpočtoch elektrónovej štruktúry a magneto-rezonančného spektra zlúčenín obsahujúcich ťažké prvky** (Towards a higher accuracy in relativistic calculations of electronic structure and magneto-resonance spectra of compounds containing heavy elements), V. Malkin, DrSc., 01/2007 – 12/2009, ev. č. APVV-0625-06, financuje APVV zo štátneho rozpočtu, 1 170 000 Sk.

Dosiahnuté výsledky: Publikácie v Prílohe 3: ADCA: 18 a AFG: 11, 12, 13

5. **Keramické progresívne materiály foto-termicko-mechanickej konverznej sústavy solárneho tepelného motora na báze parného cyklu** (Advanced ceramic materials for the photo-thermo-mechanical conversion system of solar thermal engine based on the steam cycle.), Ing. Z. Lenčoš, PhD., 02/2007-12/2009, ev.č. APVV-0448-06, 2 spoluriešiteľské organizácie, financuje APVV zo štátneho rozpočtu, 5 180 000 Sk, z toho 3 470 000 Sk pre dve spoluriešiteľské organizácie.

Dosiahnuté výsledky:

Bola pripravená séria vzoriek s rôznou otvorenou pórovitosťou a dostatočnou koróznou odolnosťou voči prehriatej pare.

Publikácie v Prílohe 3: ADCA: 30, AFE: 2, 3, 4

6. **Výskum keramických materiálov pre vysoko korozívne prostredia** (Research of ceramics materials for high corrosive environments), prof. RNDr. P. Šajgalík, DrSc., 02/2007-12/2009, ev. č. APVV-0171-06, 2 spoluriešiteľské organizácie, financuje APVV zo štátneho rozpočtu, 3 298 00 Sk, z toho 1 120 000 Sk pre 2 spolurieš. organizácie.

Dosiahnuté výsledky:

Prebehla príprava základných keramických materiálov určených na korózne testy v jednotlivých korózných médiách. Boli vykonané orientačné korózne skúšky týchto materiálov v tavenine železa, hliníka a vo flinaku.

Publikácie v Prílohe 3: ADCA: 3, 27, 43, 44, 49 ADEB: 1, AFE: 10, AFG: 30

7. **Optimalizácia tavenia skloviny EUTAL (Optimisation of EUTAL glass melting)**, prof. Ing. M. Liška, DrSc., 08/2005-08/2007, APVT-20-P06405: Nositeľ projektu TnU AD, 2 spoluriešitelia: ÚACH SAV, Johns Manville Slovakia, a.s. Trnava. Financované zo ŠR (APVV), 0 Sk.

Dosiahnuté výsledky:

1. Vývoj zariadenia a jeho aplikácia na skúmanie stability primárnej a sekundárnej peny na hladine E-skloviny v závislosti od zloženia sklárskeho kmeňa. Riešené v rámci projektu APVV-20-P06405 v spolupráci so sklárňou Johns Manville Slovakia, a.s. Trnava. Jednoznačne sa preukázala korelácia stability peny s obsahom kyseliny trihydrogénboritej v sklárskom kmeni E-skla.
2. Vývoj a verifikácia metódy stanovenia povrchového napätia analýzou profilu sediacej a visiacej kvapky.

8. **Magnetoštruktúrne korelácie v nekonvenčných magnetických materiáloch (Magnetostructural correlations in unconventional magnetic materials)**, prof. RNDr. A. Feher, DrSc., spoluriešiteľ - Ing. M. Boča, PhD., 01/2005-12/2007, ev. č. APVT-20-005204, 4 spoluriešiteľské inštitúcie, financuje MŠ - APVV zo štátneho rozpočtu, 157 000 Sk.

Dosiahnuté výsledky: Publikácia v Prílohe 3: ADCA: 19

9. **Vlastnosti molekúl s komplikovanou elektrónovou štruktúrou: Sofistikované výpočty a predpovede spektroskopických a elektrických vlastností (Properties of molecules with complicated electronic structure: Sophisticated calculations and predictions of spectroscopic and electric properties)**, spoločný projekt PriFUK, ZU, ÚACH SAV, vedúci riešiteľ prof. RNDr. M. Urban, DrSc., zodpovedný spoluriešiteľ za SAV, prof. RNDr. J. Noga, DrSc. 06/2006 – 05/2009, ev. č. APVV 018405, financuje APVV zo štátneho rozpočtu, 98 000 Sk.

Dosiahnuté výsledky: Publikácie v Prílohe 3: ADCA: 24, 38, 39, 42

10. **Korundová elektrokeramika pre unikátny typ plazmových zdrojov (Alumina electroceramics for unique types of plasma sources)**, doc. Ing. D. Galusek, PhD., 01/2007 – 12/2009, APVV 0485-06, nositeľ projektu: FMFI UK Bratislava, 1 spoluriešiteľ ÚACH SAV, financované zo ŠR (APVV), 652 000 Sk BV, 660 000 KV.

Dosiahnuté výsledky:

Dobudovanie experimentálneho vybavenia pracoviska: zakúpenie zariadenia na odlievanie keramických pásov v celkovej sume 660 tis. Sk od firmy HED, USA a zakúpenie vysokoteplotnej superkantolovej pece od firmy Krička Clasic CZ v celkovej sume 570 tis. Sk.

Vývoj metodiky na prípravu planárnych korundových elektród s hrúbkou 1 mm metódou slip casting.

11. **Keramika s polymérnych prekursorov s kontrolovanou kryštalinitou (Polymer derived nano-ceramic with controlled crystallinity)**, Prof. P. Šajgalík RNDr., DrSc., 02/2007-12/2009, ev.č. APVV 13-06, financuje APVV zo štátneho rozpočtu, 450 000,- Sk.

Dosiahnuté výsledky:

Boli pripravené hutné vzorky s prídavkami odvodenými z organometalických polymérnych prekurzorov. Po ich kryštalizácii bol zistený vznik dodatočnej pórovitosti s negatívnym vplyvom na mechanické vlastnosti.

Publikácie v Prílohe 3: AFG: 6, 22, 25

Projekty riešené v rámci ŠPVV a ŠO

- 1. Integrovaný medzirezortný prístup k skvalitneniu vzdelanostnej úrovne tvorivých zamestnancov sklárskeho priemyslu a k rozvoju experimentálnej základne aplikovaného výskumu** (Integrated attitude to increase the quality of education of productive employees of glass industry and to development of experimental basis of applied research), prof. Ing. Marek Liška, DrSc., doc. Ing. D. Galusek, PhD., 03/2004-12/2007, ev. číslo projektu 2003-SP-51/028-09-00/028-09-11, 6 spoluriešiteľských inštitúcií (EVPÚ a.s. Nová Dubnica, STU Bratislava, Ústav materiálov a mechaniky strojov SAV, Žilinská univerzita, FPT TnU AD Púchov, Strojnícka fakulta TU Košice), financie zo štátneho rozpočtu: **1 513 000 Sk**.

Dosiahnuté výsledky: Rozšírenie HW a SW portfólia pracoviska

Projekty centier excelentnosti SAV

- 1. Centrum nanoštruktúrnych materiálov (NANOSMART)** (Centre of the nanostructured materials), prof. RNDr. P. Šajgalík, DrSc., 01/2007 - 12/2010, 4 spoluriešiteľské organizácie, financuje SAV zo štátneho rozpočtu, **103 000 Sk**.

Dosiahnuté výsledky:

V rámci centra bola pozornosť venovaná aplikácii nano-štruktúrnych keramických materiálov predovšetkým v strojárskom priemysle.

Publikácie v Prílohe 3: ADCA: 1, AFDA: 1

- 2. Centrum pokročilej výpočtovej chémie (COMCHEM)** (Centre for Advanced Computational Chemistry), prof. RNDr. J. Noga, DrSc., 01/2007-12/2010, 6 spoluriešiteľských organizácií, financuje SAV zo štátneho rozpočtu, **ÚACH SAV 184 000 Sk**.

Dosiahnuté výsledky:

V zmysle cieľov CE sa v prvom roku zaviedla testovacia verzia gridového prostredia OAR, rozbehla sa spoločná výuka v rámci špecializovaných doktorandských seminárov a zaobstaral sa výpočtový klaster na báze 10 štvorjadrových procesorov Intel Xeon 5300.

Projekty podporované Európskym sociálnym fondom (ESF)

Financovanie riešenia projektov je realizované cez hlavného koordinátora (nositeľa) projektu.

- 1. Projekt ESF č. 13120200048: Vedomostný a technologický transfer v oblasti výskumu a vývoja prírodných nanomateriálov.** Hlavný koordinátor projektu PríFUK, partner ÚACH SAV, P. Komadel, J. Madejová (koordinátori vybraných aktivít)

Aktivity pracovníkov ústavu:

- Databáza projektov zaoberajúcich sa prírodnými nanomateriálmi, aktualizácia a doplnenie internetových liniek na www stránky o projektoch, konferenciách a využití prírodných nanomateriálov

- Databáza článkov o využití PN v nanotechnológiách a pri ochrane životného prostredia
- Databáza článkov o aplikáciách termických metód pri výskume prírodných nanomateriálov
- Databáza článkov o aplikáciách ílov v kozmetike, stavebníctve, geomedicíne a poľnohospodárstve
- Databáza článkov o možnostiach využitia vrstvenatých hlinítokremičitanov a zeolitov pre výskum potenciálnych optických nanomaterialov
- Databáz článkov o ložiskách bentonitov vo svete
- Vytvorenie e-learningových kurzov „Mössbauerova spektroskopia“, „Koloidné vlastnosti prírodných nanomateriálov“ a „Modifikácia náboja vrstiev ílových minerálov“
<http://www.pvoc.sk/nano/index.php>

2. Projekt ESF - Klaster pokročilých štúdií - rozvoj ďalšej vzdelanosti v oblasti multidisciplinárneho výskumu a vývoja progresívnych materiálov a nanomateriálov s ohľadom na trvalo udržateľný rozvoj. Kód projektu ITMS: 13120200055, hlavný koordinátor projektu FÚ SAV, partner ÚACH SAV, P. Šajgalík, (koordinátor vybraných aktivít)

Akcie organizované pracovníkmi ústavu:

- Účasť na seminároch a školeniach, ktoré boli organizované hlavným riešiteľom
- Zorganizovanie semináru pre odborníkov z praxe na tému termálna analýza, zorganizovanie semináru pre odborníkov z praxe na tému charakterizácia nekovových materiálov metódami SEM

3. Projekt ESF - MATNET - Vybudovanie výskumno-vývojovej a inovačnej siete pre oblasť materiálov a technológií ich spájania (č. JPD 3 2005/1-018, kód projektu 13120200076). Hlavný koordinátor projektu ÚMMS SAV, partner ÚACH SAV, P. Šajgalík, M. Hnatko, (koordinátori vybraných aktivít)

Aktivity pracovníkov ústavu:

- Príprava a dopĺňovanie www stránky : www.matnet.sav.sk
- príprava e-learningových lekcií pre užívateľov www stránky

4. Projekt ESF: ITMS kod 11230100136, číslo projektu: SOP EZ 2005/1-101, Inovatívne prístupy v motivácii mladých ľudí pre štúdium prírodovedných disciplín. Hlavný koordinátor projektu PriFUK, S. Kedžuch, (ÚACH SAV, koordinátor vybraných aktivít)

- Tri kolá súťaže z chémie a biológie korešpondenčnou formou

Iné projekty (ústavné, na objednávku rezortov a pod.)

1. Meranie a výpočet vzniku a relaxácie napätí v sklenených výrobkoch pri ich tvarovaní a chladení. (Measurement and calculation of the formation and relaxation of stresses in glass products in the course of forming and cooling), Ing. Mária Chromčíková, PhD., 01/2007-12/2009, AV 4/0025/07, nositeľ projektu TnU AD, 2 spoluriešitelia ÚACH SAV a RONA a.s.

Dosiahnuté výsledky:

Skonstruovanie zariadenia na sledovanie relaxácie mechanických napätí v malých vzorkách skla pri rôznych časovo - teplotných režimoch

2. Skúmanie chemického zloženia lúžiacich roztokov a SEM + EDS analýza korodovaných povrchov sklenených vlákien používaných ako tepelné izolácie

v amerických jadrových elektrárnách, prof. Ing. Marek Liška, DrSc., 01/2007 – 12/2007, riešené pre VÚEZ, a.s. Levice ako subkontraktor pre Alion Science (USA), fin. prínos v roku 2007: 270 000 Sk.

Dosiahnuté výsledky:

Detailné informácie o mechanizmoch a kinetike korózie povrchu sklenených vlákien a jej vzťahu k tlakovým stratám na sitách používaných v prípade havárii typu straty chladiva v jadrových elektrárnach

- 3. Použitelnosť cementov PC Ladce, a. s. pre syntézy MDF materiálov.** Expertíza v kontexte analýzy trhu využívaných polymérov a potenciálu MDF materiálov. (The usefulness of cements of PC Ladce, Ltd. for the syntheses of MDF materials. IV.). Projekt spolupráce s PC Ladce, a.s. zameraný na preverenie predpokladov vhodnosti jednotlivých cementov pre prípravu MDF materiálov. RNDr. M. Drábik, CSc., financuje Ladce, a.s., **128 000 Sk.**

Dosiahnuté výsledky:

Projekt vedecko-technickej spolupráce ukončený oponentúrou a odovzdaním Záverečnej správy

Publikácie v Prílohe 3: AEC 1 a AFHB 8

Medzinárodné projekty

Projekty 6. rámcového programu EÚ

- 1. FUNMIG (FP6-EURATOM): Fundamental processes of radionuclide migration** (Základné procesy migrácie rádionuklidov), vedúci projektu: Dr. V. Malkin, DrSc., hlavný koordinátor: Dr. G. Buckau, Institute for Nuclear Waste Disposal, Research Center Karlsruhe, Nemecko, doba riešenia 01.2005 – 12.2008, spoluriešiteľské inštitúcie: 48 skupín z 15 krajín. Finančné prostriedky pridelené **v roku 2007: 1 395 980 Sk.**

Dosiahnuté výsledky: *Publikácie v Prílohe 3:* ADCA: 19, AFE: 8, AFG: 31

- 2. SMART (FP6) Foresight Action for Multifunctional Materials Technology** (Vízia aplikovateľnosti technológie založenej na multifunkčných materiáloch), hlavný koordinátor Dr. Gerd Schumacher, Forschung Centrum Jülich, Nemecko, prof. RNDr. P. Šajgalík, DrSc., doba riešenia 2005 – 2007, ev. č SSA 517045, spoluriešiteľské inštitúcie – 5 skupín, Finančné prostriedky pridelené v roku 2007: **49 480 Sk**

Dosiahnuté výsledky:

Vypracovanie záverečnej správy: *Future perspectives of European material research*. Autori: G. Schumacher, S. Preston, A. Smith, P. Šajgalík, ktorá bola publikovaná knižne v roku 2007.

- 3. PolyCerNet: Tailored Multifunctional Polymer-derived nanoCeramics** (Multifunkčná nanokeramika pripravená z polymérov s vopred určenými vlastnosťami), ev. č. MRTN-CT-2005-019601, prof. RNDr. P. Šajgalík, DrSc., doba riešenia: 01/2006 – 12/2009, 12 spoluriešiteľov. Finančné prostriedky pridelené **v roku 2007: 659 790 Sk.**

Dosiahnuté výsledky:

V rámci projektu bolo zabezpečené doktorandské štúdium Ing. T. Plachkého, ktorý sa zúčastnil jarnej a letnej školy doktorandov v rámci „research training network“.

Publikácie v Prílohe 3: AFHB: 6, 7

Multilaterálne projekty v rámci vedeckých programov (COST, INTAS, EUREKA, ESPIRIT, PHARE, NATO, UNESCO, CERN, IAEA, ESF)

1. **Projekt COST WG 12/D26: Towards a new level of accuracy in computations of molecular structure, molecular properties, spectroscopy and thermo-chemistry** (K novej úrovni presnosti pri počítaní molekulárnej štruktúry, molekulových vlastností, spektroskopických parametrov a termochémie), prof. RNDr. J. Noga, DrSc., 08/2002 – 03/2007. Spoluriešiteľské inštitúcie: Università degli Studi di Trieste, Taliansko, Eötvös University, Budapest, Maďarsko, University of Oslo, Nórsko, Aarhus University, Dánsko, Debye Institute, Utrecht University, Holandsko, University of Silesia, Katowice, Poľsko, A. Miczkiewicz University, Poznan, Poľsko, Université Joseph Fourier, Grenoble, Francúzsko. Financuje SAV zo ŠR: 25 000 Sk.

Dosiahnuté výsledky: Publikácia v Prílohe 3: ADCA: 24

2. **Light weight and transparent armours** (Transparentné panciere s nízkou hmotnosťou) doc. Ing. D. Galusek, PhD., 01/2006-12/2008, CBP-NR-SFPP-981770. Koordinátor projektu ÚACH SAV, 3 spoluriešitelia: Saint Gobain Advanced Ceramics Turnov ČR, Ioffe Phys.-Tech. Institute of the Russian Academy of Sciences, St. Petersburg, Ruská Federácia, Institute for Single Crystals of Scientific Technological Complex "Institute for Single Crystals" of the National Academy of Sciences, Kharkov, Ukrajina, fin. prínos v roku 2007: NATO SfP 33 000 Sk, P-SAV zo štátneho rozpočtu: 47 000 Sk.

Dosiahnuté výsledky:

Bol vyvinutý prototyp vrstveného transparentného panciera, ktorý pri testoch preukázal pri hrúbke 45 mm (polovičná hrúbka oproti doteraz dostupným riešeniam) vysokú balistickú odolnosť proti AP strelám s jadrom z karbidu volfrámu.

Bilaterálne projekty

1. **Processing and properties of Si-based ternary nitrides as sintering additives and phosphors** (Príprava a tepelno-elektrické vlastnosti ternárnych nitridov na báze kremíka), bilaterálny JSPS-SAV projekt (2006-2007) medzi ÚACH SAV a Advanced Manufacturing Research Institute; High Performance Component Processing Group, AIST Nagoya, 463-8560 Nagoya, Japan. Vedúci projektu Dr. Kiyoshi Hirao a Dr. Zoltán Lenčéš.

Dosiahnuté výsledky: Publikácie v Prílohe 3: AFE: 2, 5, AFG: 18, 40

2. **α -SiAlON with needle-like microstructure for wear applications** (α -sialony s mikroštruktúrou s predĺženými zrnami vhodné na aplikácie náročné na oter). MAD s Anadolu University, Faculty of Engineering and Architecture, Department of Materials Science and Engineering, İki Eylül Campus, 26470 Eskişehir, Turecko, 2006-2007, prof. RNDr. P. Šajgalík, DrSc.

Dosiahnuté výsledky: Publikácie v Prílohe 3: ADCA: 30, 44

3. **Novel porous materials based on layered silicates** (Nové pórovité materiály na báze vrstevnatých silikátov). Spoločný projekt v rámci MAD medzi ÚACH SAV a Institute of Catalysis and Surface Chemistry, PAS, Krakow, Poland, 2007-2009, RNDr. J. Madejová, DrSc.

Dosiahnuté výsledky:

Sledoval sa vplyv experimentálnych podmienok na jednotlivé stupne syntézy mezopórových materiálov (porous clay heterostructures - PCH) z organických derivátov montmorillonitov. Vzorky získané z jednotlivých krokov syntézy boli charakterizované pomocou termickej, rtg, EDX analýzy a IČ spektroskopie, pričom hlavnou metódou bola BET analýza, pomocou ktorej sa zmerali povrchy a distribúcia pórov v pripravených PCH.

Publikácia v Prílohe 3: AFG: 28

Iné projekty financované zo zahraničných zdrojov

1. **Chemical evolution** (Chemická evolúcia), RNDr. J. Bujdák, PhD., 1.1. 2007- 31.12. 2008, ev. č. BMWF-45.530/0003-11/6a/2007, Institute for General, Inorganic and Theoretical Chemistry, University of Innsbruck, Rakúsko. Finančné prostriedky boli pridelené rakúskemu partnerovi (Prof. Bernd M. Rode).

Dosiahnuté výsledky:

Stereoselektívna adsorpcia molekúl oligopeptidov a experimenty syntéz aminokyselín typu Miller-Urey. Úloha ílových minerálov.

2. **Atomic level aspects of advanced cementitious materials** (Atomárne aspekty pokročilých materiálov na báze cementu), dlhodobý projekt dvojstrannej spolupráce ÚACH SAV a University of Surrey (Chemistry C4), UK, RNDr. M. Drábik, CSc.

Dosiahnuté výsledky:

Prínos MAS NMR spektroskopie k modelovaniu atomárnej a nano úrovni MDF materiálov.

Publikácia v Prílohe 3: ADCA: 9

Príloha č. 3

Bibliografické údaje výstupov

ADCA - Vedecké práce v zahraničných karentovaných časopisoch impaktovaných

1. BALOG, Miroslav – KEČKÉŠ, J. – SCHÖBERL, T. – GALUSEK, Dušan – HOFER, F. – KŘEŠŤAN, Ján – LENČEŠ, Zoltán – HUANG, J.L. – ŠAJGALÍK, Pavol: Nano/macro-hardness and fracture resistance of $\text{Si}_3\text{N}_4/\text{SiC}$ composites with up to 13wt.% of SiC nano-particles. In: *Journal of the European Ceramic Society*. Vol. 27, no. 5 (2007), p. 2145-2152. IF:1.576
2. BOČA, Miroslav – DANIELIK, V. – IVANOVÁ, Zuzana – MIKŠÍKOVÁ, Eva – KUBÍKOVÁ, Blanka: Phase diagrams of the $\text{KF-K}_2\text{TaF}_7$ and $\text{KF-Ta}_2\text{O}_5$ systems. In: *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*. Vol. 90, no. 1 (2007), p. 159-165. IF:1.438
3. BODIŠOVÁ, Katarína – ŠAJGALÍK, Pavol – GALUSEK, Dušan – ŠVANČÁREK, Peter: Two-stage sintering of alumina with submicrometer grain size. In: *Journal of the American Ceramic Society*. Vol. 90, no. 1 (2007), p. 330-332. IF:1.396
4. BUJDÁK, Juraj – MARTÍNEZ MARTÍNEZ, V. – LÓPEZ ARBELOA, F. – IYI, N.: Spectral properties of rhodamine 3B adsorbed on the surface of montmorillonites with variable layer charge. In: *Langmuir*. Vol. 23 (2007), p. 1851-1859. IF:3.902
5. CZÍMEROVÁ, Adriana – IYI, N. – BUJDÁK, Juraj: Energy transfer between rhodamine 3B and oxazine 4 in synthetic-saponite dispersions and films. In *Journal of Colloid and Interface Science*. Vol. 306 (2007), p. 316-322. IF:2.233
6. CZÍMEROVÁ, Adriana – BUJDÁK, Juraj: Fluorescence resonance energy transfer between laser dyes in saponite dispersions. In: *Journal of Photochemistry and Photobiology A*. Vol. 187 (2007), p. 160-166. IF:2.098
7. ČEKLOVSKÝ, Alexander – BUJDÁK, Juraj – CZÍMEROVÁ, Adriana – IYI, N.: Spectral study on the molecular orientation of a tetracationic porphyrin dye on the surface of layered silicates. In: *Central European Journal of Physics*. Vol. 5, no. 2 (2007), p. 236-243. IF:0.811
8. DERKOWSKI, A – FRANUS, W. – WANIAK-NOWICKA, H. – CZÍMEROVÁ, Adriana: Textural properties vs. CEC and EGME retention Na-X zeolite prepared from fly ash at room temperature. In: *International Journal of Mineral Processing*. Vol. 82 (2007), p. 57-68. IF:0.884
9. DRÁBIK, Milan – GÁLIKOVÁ, Ľubica – BALKOVIC, Svetozár – SLADE, R.C.T.: Potential of portland cements for MDF materials. In: *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. Vol. 68 (2007), p. 1057-1061. IF:1.164
10. DUSZA, J. – KAŠIAROVÁ, M. – VYSOCKÁ, A. – ŠPAKOVÁ, J. – HNATKO, Miroslav – ŠAJGALÍK, Pavol: High temperature properties of a SiCN derived $\text{Si}_3\text{N}_4+\text{SiC}$ micro/nanocomposite. In: *High Temperature Materials and Processes*. Vol. 26, no. 1 (2007), p. 7-16. IF:0.145
11. FRITSCHER, J. – HROBÁRIK, Peter – KAUPP, M.: Computational studies of electron paramagnetic resonance parameters for paramagnetic molybdenum complexes. 1. Method validation on small and medium-sized systems. In: *Journal of Physical Chemistry B*. Vol. 111 (2007), p. 4616-4629. IF:4.115
12. FRITSCHER, J. – HROBÁRIK, Peter – KAUPP, M.: Computational studies of EPR parameters for paramagnetic molybdenum complexes. II. Larger Mo^V systems relevant to molybdenum enzymes. In: *Inorganic chemistry*. Vol. 46, no. 20 (2007), p. 8146-8161. IF:3.911
13. GALUSEK, Dušan – SEDLÁČEK, Jaroslav – ŠVANČÁREK, Peter – RIEDEL, R. – SATET, R. – HOFFMANN, M.: The influence of post-sintering HIP on the microstructure, hardness and indentation fracture toughness of polymer-derived $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-SiC}$ nanocomposites. In: *Journal of the European Ceramic Society*. Vol. 27, no. 2-3 (2007), p. 1237-1245. IF:1.576
14. GALUSEK, Dušan – SEDLÁČEK, Jaroslav – RIEDEL, R.: $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-SiC}$ composites prepared by warm pressing and sintering of an organosilicon polymer-coated alumina powder. In: *Journal of the European Ceramic Society*. Vol. 27, no. 6 (2007), p. 2385-2392. IF:1.576
15. HRACHOVÁ, Jana – KOMADEL, Peter – FAJNOR, V.Š.: The effect of mechanical treatment on the structure of montmorillonite. In: *Materials Letters*. Vol. 61 (2007), p. 3361-3365. IF:1.353

16. HRACHOVÁ, Jana – MADEJOVÁ, Jana – BILLIK, P. – KOMADEL, Peter – FAJNOR, V.Š.: Dry grinding of Ca and octadecyltrimethylammonium montmorillonite. In: *Journal of Colloid and Interface Science*. Vol. 316 (2007), p. 589-595. IF:2.233
17. HRICOVÍNÍ, M. – SCHOLTZOVA, Eva – BÍZIK, F.: B3LYP/6-311++G** study of structure and spin-spin coupling constant in heparin disaccharide. In: *Carbohydrate Research*. Vol. 342 (2007), p. 1350-1356. IF:1.703
18. HROBÁRIK, Peter – HORVÁTH, B. – SIGMUNDOVÁ, I. – ZAHRADNÍK, P. – MALKINA, Oľga: The impact of the π -electron conjugation on ^{15}N , ^{13}C and ^1H NMR chemical shifts in *push-pull* benzothiazolium salts. Experimental and theoretical study. In: *Magnetic Resonance in Chemistry*. Vol. 45 (2007), p. 942-953. IF:1.610
19. HROBÁRIK, Peter – REVIKINE, R. – ARBUZNIKOV, A.V. – MALKINA, Oľga – MALKIN, Vladimír – KÖHLER, F.H. – KAUPP, M.: Density functional calculations of NMR shielding tensors for paramagnetic systems with arbitrary spin multiplicity: Validation on 3 *d* metallocenes. In: *Journal of Chemical Physics*. Vol. 126 (2007), p. 024107-1-024107-19. IF:3.166
20. CHITU, L. – CHUSHKIN, Y. – LUBY, S. – MAJKOVÁ, E. – ŠATKA, A. – IVAN, J. – SMRČOK, Ľubomír – BUCHAL, A. – GIERSIG, M. – HILGENDORFF, M.: Structure and self-assembling of Co nanoparticles. In: *Materials Science and Engineering C*. Vol. 27 (2007), p. 23-28. IF:1.325
21. CHROMČÍKOVÁ, Mária – LIŠKA, Marek: Viscosity and structural relaxation of $15\text{Na}_2\text{O}\cdot x\text{MgO}\cdot(10-x)\text{CaO}\cdot 75\text{SiO}_2$ glasses. In: *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*. Vol. 90, no. 2 (2007), p. 421-429. IF:1.438
22. JANEK, Marián – EMMERICH, K. – HEISLER, S. – NÜESCH, R.: Thermally induced grafting reactions of ethylene glycol and glycerol intercalates of kaolinite. In: *Chemistry of Materials*. Vol. 19 (2007), p. 684-693. IF:5.104
23. JI, Y.Q. – BLACK, L. – KÖSTER, R. – JANEK, Marián: Hydrophobic coagulation aggregation of hematite particles with sodium dodecylsulfate. In: *Colloids and Surfaces A*. Vol. 298 (2007), p. 235-244. IF:1.611
24. KAHN, K. – GRANOVSKY, A.A. – NOGA, Jozef: Convergence of third order correlation energy in atoms and molecules. In: *Journal of Computational Chemistry*. Vol. 28, no. 2 (2007), p. 547-554. IF:4.893
25. KARELL, R. – KRAXNER, J. – CHROMČÍKOVÁ, Mária: Properties of selected zirconia containing silicate glasses II. In: *Ceramics – Silikáty*. Vol. 51, no. 3 (2007), p. 125-130. IF:0.597
26. KORENKO, Michal: Influence of sulphur impurities on the interfacial tension between aluminium and cryolite alumina melts. In: *Zeitschrift für Naturforschung*. Vol. 62a (2007), p. 309-314. IF:0.904
27. KŘEŠŤAN, Ján – PRITULA, O. – SMRČOK, Ľubomír – ŠAJGALÍK, Pavol – LENČEŠ, Zoltán – WANNBERG, A. – MONTEVERDE, F.: Corrosion of β -sialon-based ceramics by molten steel. In: *Journal of the European Ceramic Society*. Vol. 27 (2007), p. 2137-2143. IF:1.576
28. KUBÍKOVÁ, Blanka – DANĚK, V. – GAUNE-ESCARD, M.: Physicochemical properties of melts used for the electrodeposition of niobium. In: *Zeitschrift für Naturforschung*. Vol. 62a (2007), p. 540-544. IF:0.904
29. KUCHARÍK, Marián – ŠIMKO, František – DANIELIK, V. – BOČA, Miroslav – VASILJEV, Roman: Thermal analysis of the system $\text{Na}_3\text{AlF}_6\text{--NaVO}_3$. In: *Monatshefte für Chemie*. Vol. 138 (2007), p. 1211-1215. IF:0.920
30. KUSHAN, S.R. – ACIKBAS, N.C. – KŘEŠŤAN, Ján – ŠAJGALÍK, Pavol – MANDAL, H.: Role of α -SiAlON nuclei addition on the rod-like Y-Sm α -SiAlON formation. In: *Materials Science Forum*. Vol. 554 (2007), p. 101-106. IF:0.399
31. LANGER, V. – SCHOLTZOVA, Eva – GYEPESOVÁ, D. – LUSTOŇ, J. – KRONEK, J.: 2-(2-Oxazolin-2-yl)benzene-1,4-diol: X-ray and density functional theory studies. In: *Acta Crystallographica C*. Vol. C63 (2007), p. 187-189. IF:0.896
32. LANGER, V. – GYEPESOVÁ, Dalma – MACH, P. – SCHOLTZOVA, Eva – SALIŠOVÁ, M. – BOHÁČ, A. – GÁŠPÁR, B.: *anti*-2-Hydroxy-2-methyl-1-tetralone oxime: X-ray and density functional theory study. In: *Acta Crystallographica C*. Vol. 62 (2006), p. 199-202. IF:0.896
33. LANGER, V. – SCHOLTZOVA, Eva – KOÓŠ, M.: 3-(4-Bromophenyl)-5-(4-dimethylaminophenyl)-1-phenyl-2-pyrazoline: X-ray and density functional theory (DFT) studies. In: *Acta Crystallographica C*. Vol. 63 (2007), p. 340-342. IF:0.896

34. LANGER, V. – SCHOLTZOVÁ, Eva – MILATA, V. – SOLČAN, T.: (E)-Methyl 2-anilinomethylene-3-oxobutanoate: X-ray and density functional theory studies. In: *Acta Crystallographica C*. Vol. 63 (2007), p. 552-554. IF:0.896
35. LICHVÁR, Peter – ŠAJGALÍK, Pavol – LIŠKA, Marek – GALUSEK, Dušan: CaO–SiO₂–Al₂O₃–Y₂O₃ glasses as model grain boundary phases for Si₃N₄ ceramics. In: *Journal of the European Ceramic Society*. Vol. 27, no. 1 (2007), p. 429-436. IF:1.576
36. MADEJOVÁ, Jana – ANDREJKOVIČOVÁ, Slávka – BUJDÁK, Juraj – ČEKLOVSKÝ, Alexander – HRACHOVÁ, Jana – VALÚCHOVÁ, Jana – KOMADEL, Peter: Characterization of products obtained by acid leaching of Fe-bentonite. In: *Clay Minerals*. Vol. 42 (2007), p. 527-540. IF:0.974
37. MACHÁČEK, J. – GEDEON, O. – LIŠKA, Marek – CHARVÁTOVÁ, S.: First principles molecular dynamics of silicate oxynitride melt doped with skandium, yttrium and lanthanum. In: *Journal of Non-Crystalline Solids*. Vol. 353, no. 18-21 (2007), p. 2025-2028. IF:1.362
38. MEDVEĎ, M. – NOGA, Jozef – JACQUEMIN, D. – ASSFELD, X. – PERPÈRE, E.A.: NLO responses of small polymethineimine oligomers: A CCSD(T) study. In: *Journal of Molecular Structure: Theochem*. Vol. 821 (2007), p. 160-165. IF:1.016
39. MILKO, Matúš – NOGA, Jozef – VARGA, Štefan: Accuracy of density fitting in calculation of two-electron repulsion integrals in periodic systems. In: *International Journal of Quantum Chemistry*. Vol. 107 (2007), p. 2158-2168. IF:1.182
40. MIŠÍKOVÁ, L. – LIŠKA, Marek – GALUSKOVÁ, D.: Corrosion of e-glass in distilled water. In: *Ceramics – Silikáty*. Vol. 51, no. 3 (2007), p. 131-135. IF:0.597
41. NERÁD, Ivan – MIKŠÍKOVÁ, Eva: Thermochemical properties of the Fe-analogue of cryolite, Na₃FeF₆. In: *Central European Journal of Chemistry*. Vol. 5, no. 2 (2007), p. 508-515. IF:0.561
42. NOGA, Jozef – KEDŽUCH, Stanislav – ŠIMUNEK, J.: Second order explicitly correlated R12 theory revisited: A second quantization framework for treatment of the operators' partitionings. In: *Journal of Chemical Physics*. Vol. 127 (2007), p. 034106-1-034106-11. IF:3.166
43. PETRUŠKOVÁ, V. – VRÁBEL, P. – ŠIMURKA, P. – ŠAJGALÍK, Pavol – MARYŠKA, M.: Surface damage of two different wineglasses during dishwashing process. In: *Ceramics – Silikáty*. Vol. 51, no. 1 (2007), p. 57-66. IF:0.597
44. SALAMON, D. – SHEN, Z. – ŠAJGALÍK, Pavol: Rapid formation of α -sialon during spark plasma sintering: Its origin and implications. In: *Journal of the European Ceramic Society*. Vol. 27 (2007), p. 2541-2547. IF:1.576
45. SLÁDKOVIČOVÁ, Mariana – MACH, P. – SMRČOK, Ľubomír – RUNDLÖF, H.: DFT and neutron diffraction study of 1,6-antihydro- β -D-glucopyranose (levoglucosan). In: *Central European Journal of Chemistry*. Vol. 5, no. 1 (2007), p. 55-70. IF:0.561
46. SLÁDKOVIČOVÁ, Mariana – SMRČOK, Ľubomír – MACH, P. – TUNEGA, D. – KOLESNIKOV, A.I.: Inelastic neutron and DFT study of 2-amino-3-hydroxymethyl-1,3-propane diol (TRIS). In: *Chemical Physics*. Vol. 340 (2007), p. 245-259. IF:1.984
47. SMRČOK, Ľubomír – JORÍK, V. – SCHOLTZOVÁ, Eva – MILATA, V.: *Ab initio* structure determination of 5-anilinomethylene-2,2-dimethyl-1,3-dioxane-4,6-dione from laboratory powder data – a combined use of X-ray, molecular and solid-state DFT study. In: *Acta Crystallographica B*. Vol. 63 (2007), p. 477-484. IF:2.172
48. SMRČOK, Ľubomír – PICCOLI, P.M. – SCHULTZ, A.J. – SLÁDKOVIČOVÁ, Mariana – MACH, P.: On hydrogen bonding in 2-amino-3-hydroxymethyl-1,3-propane diol (TRIS) – variable temperature neutron single crystal and DFT study. In: *Zeitschrift für Kristallographie*. Vol. 222 (2007), p. 555-565. IF:1.897
49. ŠAJGALÍK, Pavol – KŘEŠŤAN, Ján – LENČEŠ, Zoltán: Corrosion resistance of β -SiAlON-based ceramics against molten steel. In: *Materials Science Forum*. Vol. 554 (2007), p. 147-150. IF:0.399
50. ŠIMKO, František – BOČA, Miroslav: Phase analysis of the binary system of cryolite (Na₃AlF₆) and sodium metasilicate (Na₂SiO₃). In: *Helvetica Chimica Acta*. Vol. 90 (2007), p. 1529-1537. IF:1.550
51. ŠUCHA, V. – UHLÍK, P. – MADEJOVÁ, Jana – PETIT, S. – KRAUS, I. – PUŠKELOVÁ, Ľ.: Particle properties of hydrothermal ammonium-bearing illite-smectite. In: *Clays and Clay Minerals*. Vol. 55, no. 1 (2007), p. 36-44. IF:1.423

52. VARGA, Štefan: Grid-free density functional calculations on periodic systems. In: *Journal of Chemical Physics*. Vol. 127 (2007), p. 114108-1-114108-6. IF:3.166
53. JÓNA, E. – RUDINSKÁ, G. – SAPIETOVÁ, M. – PAVLÍK, V. – DRÁBIK, Milan – MOJUMDAR, SC.: Interactions of different heterocyclic compounds with monoionic forms of montmorillonite. Thermal, IR-spectral and X-ray studies of Ni(II)-montmorillonite with 3-R and 2-R pyridines ($R=CH_3, Cl, NH_2$). In: *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*. Vol. 90, no. -34 (2007), p. 687-691. IF:1.438

ADCB - Vedecké práce v zahraničných karentovaných časopisoch neimpaktovaných

1. BENCO, Ľubomír – BUČKO, T. – GRYBOS, R. – HAFNER, J. – SOBALÍK, Z. – DĚDEČEK, J. – HRUŠÁK, J.: Adsorption of NO in Fe^{2+} -exchanged ferrierite. A density functional theory study. In: *Journal of Physical Chemistry C*. Vol. 111 (2007), p. 586-595.
2. BENCO, Ľubomír – BUČKO, T. – GRYBOS, R. – HAFNER, J. – SOBALÍK, Z. – DEDECEK, J. – SKLENÁK, S. – HRUŠÁK, J.: Multiple adsorption of No on Fe^{2+} cations in the α - and β -positions of ferrierite: An experimental and density functional study. In: *Journal of Physical Chemistry C*. Vol. 111 (2007), p. 9393-9402.
3. GRYBOS, R. – HAFNER J. – BENCO, Ľubomír – TOULHOAT H.: Structure of active sites in Pd-exchanged mordenite: A density functional investigation. In: *Journal of Physical Chemistry C*. Vol. 111 (2007), p. 6454-6464.

ADDA - Vedecké práce v domácich karentovaných časopisoch impaktovaných

1. BOČA, Miroslav – KUCHARÍK, Marián: Notes on notation of sodium oxofluoroaluminate anions. In: *Chemical Papers*. Vol. 61, no. 3 (2007), p. 217-220. IF:0.360
2. KOSA, Ladislav – MACKOVÁ, Iveta – ŠIMKO, František: Determination of the enthalpy of fusion of Na_3FeF_6 . In: *Chemical Papers*. Vol. 61, no. 3 (2007), p. 221-223. IF:0.360
3. KUCHARÍK, Marián – CHAMELOT, P. – CASSAYRE, L. – TAXIL, P.: Silver as anode in cryolite—alumina-based melts. In: *Chemical Papers*. Vol. 61, no. 2 (2007), p. 142-145. IF:0.360
4. VYSOCKÁ, A. – ŠPAKOVÁ, J. – DUSZA, J. – BALOG, Miroslav – ŠAJGALÍK, Pavol: Microstructure and mechanical properties of liquid-phase-sintered SiC + Si_3N_4 composites. In: *Kovové Materiály*. Vol. 45, no. 4 (2007), p. 223-229. IF:1.138

ADFB: Vedecké práce v domácich nekarentovaných časopisoch neimpaktovaných

1. STRÍČEK, I. – ŠUCHA, V. – UHLÍK, P. – MADEJOVÁ, Jana: Zvetrávanie smektitu na ložiskách bentonitu. In: *Mineralia Slovaca*. Vol. 38 (2006), p. 337-342.
2. ŠUCHA, V. – MADEJOVÁ, Jana – UHLÍK, P. – BIROŇ, A. – VOZÁROVÁ, A.: Amónne illity v Západných Karpatoch. In: *Mineralia Slovaca*. Vol. 38 (2006), p. 327-335.
3. VYSOCKÁ, A. – ŠPAKOVÁ, J. – DUSZA, J. – BALOG, Miroslav – ŠAJGALÍK, Pavol: Mechanical properties of submicron sized of SiC ceramics. In: *Powder Metallurgy Progress*. Vol. 6, no. 2 (2006), p. 99-105.

AEC - Vedecké práce v zahraničných recenzovaných vedeckých zborníkoch (aj konferenčných), monografiach

1. DRÁBIK, Milan – BALKOVIC, Svetozár – MARTAUZ, P. – STRIGÁČ, J. – BÁGEL, E.: Macro-defect-free materials; potential of Portland cements. In: *12th International Congress on the Chemistry of Cement*. Kanada, 2007, p. (elektronický optický disk).
2. PALOU, M. – DOVÁĽ, M. – DRÁBIK, Milan: Application of sol-gel technique to synthesize inorganic binder materials with upgraded hydration characteristics. In: *12th International Congress on the Chemistry of Cement*. Kanada, 2007, p. (elektronický optický disk).
3. KUBÍKOVÁ, Blanka – CIBULKOVÁ, Jarmila – DANĚK, Vladimír – GAUNE-ESCARD, Marcelle: Physicochemical properties of molten $KF-K_2NbF_7-Nb_2O_5$ system. In: *ECS Transactions*. Vol.35, no.3, 2007, p.169-178

AFC – Publikované príspevky na zahraničných vedeckých konferenciách

1. BENCO, Ľubomír – BUČKO, T. – GRYBOS, R. – HAFNER, J. – TOULHOAT, H.: A DFT study of activation of H₂ and CH₄ over Zn-MOR. In: *Studies in Surface Science and Catalysis*. Tokyo, 2007, p. 397-304.
2. CHROMČÍKOVÁ, Mária – LIŠKA, Marek – KRŠIAK, M.: Objemová relaxácia boritáno – kremičitanových skiel. In: *29. Mezinárodní český a slovenský kalorimetrický seminář*. Pardubice, 2007, p. 103-106.
3. LIŠKA, Marek – CHROMČÍKOVÁ, Mária – RODOVÁ, M. – NITSCH, K. – ČERNOŠEK, Z.: Klasická nukleačne rastová teória a jej aplikácie. In: *29. Mezinárodní český a slovenský kalorimetrický seminář*. Pardubice, 2007, p. 79-84.
4. MACHÁČEK, J. – GEDEON, O. – LIŠKA, Marek: The MD study of mixed alkali effect in binary alkali silicate glasses. In: *ICG 2007: XXI. Internatioanl congress of glass*. Strasbourg, 2007, (elektronický optický disk)
5. PRNOVÁ, Anna – LICHVÁR, Peter – GALUSEK, Dušan – HNATKO, Miroslav: Flame synthesis of aluminate glass microspheres. In: *ICG 2007: XXI. Internatioanl congress of glass*. Strasbourg, 2007, (elektronický optický disk)
6. BALKOVIC, Svetozár – PETEJA, M. – DRÁBIK, Milan: Aered autoclaved concrete production from fluidized ash. In: *XI. International Conference of Research Institute of Building Materials" Ecology and new building materials and products,..*. Telč, 2007, p. 120-124.
7. BALKOVIC, Svetozár – PETEJA, M. – DRÁBIK, Milan: Výroba pórobetónu z fluidného popolčeka. In: *Maltoviny 2007*. Brno, 2007, p. 12-24.

AFDA – Publikované príspevky na medzinárodných vedeckých konferenciách poriadaných v SR

1. HNATKO, Miroslav – GALUSEK, Dušan – LOJANOVÁ, Štefánia – ŠAJGALÍK, Pavol: Si₃N₄/SiC nanocomposites prepared by the addition of SiO₂+C by hot pressing or gas pressure sintering. In: *Proceedings of VIIth International Conference: Preparation of Ceramic Materials*. Košice, 2007, p. 96-100.
2. KARELL, R. – KRAXNER, J. – CHROMČÍKOVÁ, Mária – LIŠKA, Marek: Propertis of selected zirconia containing silicate glasses. In: *Proceedings of VIIth International Congerence: Preparation of Ceramic Materials*. Herľany, 2007, p. 144-147.
3. KARELL, R. – KRAXNER, J. – CHROMČÍKOVÁ, Mária – LIŠKA, Marek: Properties of selected zirconia containing silicate glasses. In: *12th International Conference on Problems of Material Engineering, Mechanics and design*. Jasná, 2007, (elektronický optický disk)
4. KRAXNER, J. – KLEMENT, R. – LIŠKA, Marek: The alumino-borosilicate glass melts in the MgO-CaO-Al₂O₃-B₂O₃-SiO₂ system-physicochemical properties and foam formation. In: *12th International Conference on Problems of Material Engineering, Mechanics and design*. Jasná, 2007, (elektronický optický disk)
5. LIŠKA, Marek – CHROMČÍKOVÁ, Mária: Mechanical testing of the strand of glass fibers – model. In: *Proceedings of VIIth International Congerence: Preparation of Ceramic Materials*. Herľany, 2007, p. 154-159.
6. PRNOVÁ, Anna – LICHVÁR, Peter – GALUSEK, Dušan: The preparation of aluminate glass microspheres by synthesis in CH₄O₂ flame. In: *12th International Conference on Problems of Material Engineering, Mechanics and design*. Jasná, 2007, (elektronický optický disk)
7. RESCHKE, S. – GALUSEK, Dušan: Isothermal oxidation behaviour of a polymer-derived amorphous Si/C/N ceramic. In: *12th International Conference on Problems of Material Engineering, Mechanics and design*. Jasná, 2007, (elektronický optický disk)

AFE – Abstrakty pozvaných príspevkov zo zahraničných konferencií

1. GALUSEK, Dušan: Advanced sintering methods for preparation of nanostructured ceramics. In: *VI. Konferencja Polskiego Towarzystwa Ceramicznego*. Zakopané, 2007.
2. HIRAO, K. – ZHOU, Y. – ZHU, X. – LENČEŠ, Zoltán – ŠAJGALÍK, Pavol: Processing parameters affecting thermal and mechanical properties on sintered reaction bonded silicon nitrides. In: *2nd International Symposium on Sialons and Non-oxide*. Mie, 2007

3. LENČEŠ, Zoltán – HNATKO, Miroslav – ŠAJGALÍK, Pavol – GALUSEK, Dušan: Silicon nitride based composites with tailored mechanical and functional properties. In: *2nd International Conference on Recent Advances in Composite Materials*. New Delhi, 2007
4. LENČEŠ, Zoltán – ŠAJGALÍK, Pavol – PLACHKÝ, Tomáš – ZHOU, Y. – HIRAO, K. – RIEDEL, R.: Effect of polymer derived ceramics and ternary nitride sintering aids on the thermal conductivity of silicon nitride. In: *International Symposium on Advanced Ceramics and Technology for Sustainable Energy Applications, ACTSEA 2007*. Kenting, 2007
5. LENČEŠ, Zoltán – ŠAJGALÍK, Pavol – PLACHKÝ, Tomáš – ZHOU, Y. – HIRAO, K. – RIEDEL, R.: Ternary nitrides with thermo electrical and optical properties and related silicon nitride-based composites. In: *MRS Fall Meeting, Symposium Q: Nitrides and related materials*. Boston, 2007
6. MALKIN, Vladimír – MALKINA, Oľga – KOMOROVSKÝ, Stanislav – REPISKÝ, Michal – MALKIN, I. – KAUPP, M.: Four-component calculation of NMR chemical shifts in the framework of the modified matrix Dirac-Kohn-Sham equation. In: *deMon Workshop 2007*. Paríž, 2007
7. MALKINA, Oľga – MALKIN, Vladimír – MALKIN, E. – MALKIN, I. – KAUPP, M.: Recent developments in relativistic calculations of EPR parameters. In: *deMon Workshop 2007*. Paríž, 2007.
8. MALKINA, Oľga – MALKIN, Vladimír – KOMOROVSKÝ, Stanislav – REPISKÝ, Michal – MALKIN, E. – MALKIN, I. – KAUPP, M.: A fully relativistic generalized kinetically balanced method for calculation of EPR and NMR parameters in the framework of the modified matrix dirac-kohn-sham equation. In: *Relativistic Effects in Heavy Elements (REHE)*. Ottrott-Strasbourg, 2007
9. ŠAJGALÍK, Pavol – LENČEŠ, Zoltán – HNATKO, Miroslav – SALAMON, D. – SEDLÁČEK, Jaroslav – GALUSEK, Dušan: Oxide and non-oxide composites for ceramic cutting tools application. In: *International Conference and Exposition of the European Ceramic Society*. Berlín, 2007
10. ŠAJGALÍK, Pavol – KŘEŠŤAN, Ján – LENČEŠ, Zoltán: Sialons from aluminosilicates – processing, RT properties, corrosion and oxidation resistance. In: *2nd International Symposium on Sialons and Non-oxide*. Mie, 2007

AFFA - Abstrakty pozvaných príspevkov z medzinárodných vedeckých konferencií poriadaných v SR

1. KOMADEL, Peter – HRACHOVÁ, Jana: Clay minerals used in polymer-clay composites. In: *Nanoved 4th International Conference on Nanoscience and Nanotechnologies*. Bratislava, 2007, p. 21

AFG – Abstrakty príspevkov zo zahraničných konferencií

1. BUJDÁK, Juraj – CZÍMEROVÁ, Adriana – IYI, N. – LÓPEZ ARBELOA, F.: Energy transfer between rhodamine dye cations controlled by clay mineral templates. In: *COMET XX. 20th International Conference on Molecular Energy Transfer*. Arcachon, 2007, P. 73
2. BUJDÁK, Juraj – IYI, N.: Optical properties based on oxazine 4/hexadecyltrimethylamménium montmorillonite films. In: *EUROCLAY 2007*. Aveiro, 2007, P. 91
3. CZÍMEROVÁ, Adriana – JANKOVIČ, Ľuboš – BUJDÁK, Juraj: Effect of the exchangeable cations on the spectral properties of methylene blue in clay dispersions. In: *EUROCLAY 2007*. Aveiro, 2007, P. 271
4. ČEKLOVSKÝ, Alexander – BUJDÁK, Juraj: Spectroscopic study of interaction of porphyrin dyes with representative layered silicates. In: *International Conference: „Modern Physical Chemistry for Advanced Materials.”* Ukrajina, 2007, P. 180
5. ČEKLOVSKÝ, Alexander – BUJDÁK, Juraj: Interaction of porphyrin dyes with layered-silicate templates: An UV-VIS and fluorescence approach. In: *EUROCLAY 2007*. Aveiro, 2007, P. 270
6. DUSZA, J. – ŠAJGALÍK, Pavol: Ceramic nanocomposites. In: *NANOVED 2007 - 4th International Conference on Nanoscience and Nanotechnologies*. Brno, 2007.
7. FRANKOVSKÁ, J. – ANDREJKOVIČOVÁ, Slávka – JANOTKA, I.: Sodium bentonite-attapulgit filler for geosynthetic clay liners with increased resistance to salinary waters. In: *EUROCLAY 2007*. Aveiro, 2007, P. 192
8. HNATKO, Miroslav – LOJANOVÁ, Štefánia – ŠAJGALÍK, Pavol: Si₃N₄/SiC nanocomposite prepared by the addition of SiO₂+C by hot pressing and gas pressure sintering methods. In: *NANOVED 2007 - 4th International Conference on Nanoscience and Nanotechnologies*. Brno, 2007

9. HRACHOVÁ, Jana – VALÚCHOVÁ, Jana – MADEJOVÁ, Jana – BILLIK, P. – FAJNOR, V.Š. – KOMADEL, Peter: Mechanical treatment of unmodified and organically modified montmorillonite. In: *EUROCLAY 2007*. Aveiro, 2007, P. 211
10. HRACHOVÁ, Jana – CHODÁK, I. – KOMADEL, Peter: Montmorillonite as filler nanocomposites with elastomeric matrix. In: *EUROCLAY 2007*. Aveiro, 2007, P. 269
11. HROBÁRIK, Peter – FRITSCHER, J. – MALKINA, Oľga – MALKIN, Vladimír – KAUPP, M.: DFT studies of EPR parameters for paramagnetic molybdenum complexes. How important are relativistic effects? In: *Relativistic Effects in Heavy Elements (REHE)*. Ottrott-Strasbourg, 2007.
12. HROBÁRIK, Peter – FRITSCHER, J. – KAUPP, M.: DFT studies of EPR parameters for small and longer paramagnetic molybdenum complexes relevant to molybdoenzymes. In: *11th International Conference on Chemistry and the Environment (50th Anniversary Polish Chemical Society and Polish Association of Chemical Engineers Congress)*. Toruń, 2007.
13. HROBÁRIK, Peter – REVIKINE, R. – ARBUZNIKOV, A.V. – MALKINA, Oľga – MALKIN, Vladimír – KÖHLER, F.H. – KAUPP, M.: Density functional calculations of NMR shielding tensors for paramagnetic systems with arbitrary spin multiplicity. In: *11th International Conference on Chemistry and the Environment (50th Anniversary Polish Chemical Society and Polish Association of Chemical Engineers Congress)*. Toruń, 2007.
14. HROBÁRIK, Peter – STRAKA, M. – PYYKKÖ, P.: Computational study of bonding trends in the metalloactinyl series EThM and MThM' (E = N, O, F⁺; M, M' = Ir, Pt, Au⁺). In: *Relativistic Effects in Heavy Elements (REHE)*. Ottrott-Strasbourg, 2007.
15. HROBÁRIKOVÁ, V. – GAJDOŠ, P. – HROBÁRIK, Peter – MAGDOLEN, P. – ZAHRAĐNÍK, P.: Novel highly fluorescent π -conjugated benzothiazole derivatives with donor-acceptor-donor constitution. In: *11th International Conference on Chemistry and the Environment (50th Anniversary Polish Chemical Society and Polish Association of Chemical Engineers Congress)*. Toruń, 2007.
16. IVANOVÁ, Zuzana – BOČA, Miroslav – MLYNÁRIKOVÁ, Jarmila: Density of the molten fluoride system based on tantalum. In: *15th European Symposium on Fluoride Chemistry*. Praha, 2007, P. 347
17. JUREČEKOVÁ, J. – BUJDÁKOVÁ, H. – BUJDÁK, Juraj: Efficiency of clay mineral dispersions with methylene blue to clinically and environmentally interesting microorganisms. In: *Power of Microbes in Industry and Environment*. Zadar, 2007, P. 94
18. KIPSOVÁ, Linda – LENČEŠ, Zoltán: Synthesis of ternary nitride powders. In: *Proceedings of VIIth International Conference Preparation of Ceramic Materials*. Košice, 2007, P. 18-19
19. KOMADEL, Peter – ANDREJKOVIČOVÁ, Slávka – HRACHOVÁ, Jana – MADEJOVÁ, Jana – JANOTKA, I. – STUCKI, J.: Properties of potential use of a ferruginous bentonite in environmental protection. In: *EUROCLAY 2007*. Aveiro, 2007, P. 173
20. KOMOROVSKÝ, Stanislav – REPISKÝ, Michal – MALKINA, Oľga – MALKIN, Vladimír – MALKIN, I. – KAUPP, M.: DKS₂-RI: Dirac-kohn-sham resolution of identity method. In: *Relativistic Effects in Heavy Elements (REHE)*. Ottrott-Strasbourg, 2007, P.49
21. KORENKO, Michal – KUCHARÍK, Marián – JANIČKOVIČ, D.: Nanomorphology of rapid solidified cryolite-alumina melts. In: *15th European Symposium on Fluoride Chemistry*. Praha, 2007, P. 319
22. KOVALČÍKOVÁ, A. – DUSZA, J. – BALOG, Miroslav – ŠAJGALÍK, Pavol: Microstructure and mechanical properties of silicon carbide based ceramics. In: *NANOVED 2007 - 4th International Conference on Nanoscience and Nanotechnologies*. Brno, 2007.
23. KUBÍKOVÁ, Blanka – MLYNÁRIKOVÁ, Jarmila – BOČA, Miroslav: Some physicochemical properties of NaF-KF-K₂NbF₇ molten system. In: *15th European Symposium on Fluoride Chemistry*. Praha, 2007, P. 372
24. KUCHARÍK, Marián – KORENKO, Michal – JANIČKOVIČ, D.: Analysis of rapid solidified cryolite-alumina melts. In: *15th European Symposium on Fluoride Chemistry*. Praha, 2007, P. 322
25. LOJANOVÁ, Štefánia – HNATKO, Miroslav – LENČEŠ, Zoltán – ŠAJGALÍK, Pavol: Effect of the rare-earth oxide additives and SiC nanoparticles on mechanical properties of Si₃N₄/SiC micro/nanocomposite. In: *Processing and application of ceramics*. Berlin, 2007
26. MADEJOVÁ, Jana: Application of the infrared techniques in clay minerals investigation. In: *EUROCLAY 2007*. Aveiro, 2007, P. 84

27. MLYNÁRIKOVÁ, Jarmila – BOČA, Miroslav – KIPSOVÁ, Linda: The role of the cation in the volume properties of the melts MF-K₂NbF₇ (MF=LiF-NaF, LiF-KF and NaF-KF). In: *15th European Symposium on Fluoride Chemistry*. Praha, 2007, P. 344
28. PÁLKOVÁ, Helena – ZIMOWSKA, M. – OLEJNICZAK, Z. – SERWICKA, E.M.: Alumination of porous clay heterostructures prepared from synthetic trioctahedral smectite via templating process. In: *EUROCLAY 2007*. Aveiro, 2007, P. 101
29. PENTRÁK, Martin – MADEJOVÁ, Jana: Alterations of clay minerals induced by acid and alkali treatments. In: *EUROCLAY 2007*. Aveiro, 2007, P. 197
30. PLACHKÝ, Tomáš – KŘEŠŤAN, Ján – KORENKO, Michal – LENČEŠ, Zoltán – ŠAJGALÍK, Pavol: Corrosion of β -sialon in molten aluminium, cryolite and NaCl-KCl mixture. In: *Proceedings of VIIth International Conference Preparation of Ceramic Materials*. Košice, 2007, P. 20-21
31. REPISKÝ, Michal – KOMOROVSKÝ, Stanislav – MALKINA, Oľga – MALKIN, Vladimír – MALKIN, I. – KAUPP, M.: A fully relativistic generalized kinetically balanced method for calculation of NMR parameters in the framework of the modified matrix dirac-kohn-sham equation. In: *Relativistic Effects in Heavy Elements (REHE)*. Ottrott-Strasbourg, 2007, P. 30
32. SCHOLTZOVÁ, Eva – SMRČOK, Ľubomír: On recognition of FA/NMFA-dickite intercalates – total energy vs intensity data. In: *European Crystallographic Meeting ECM24*. Marrakech, 2007, P. 272
33. SLÁDKOVIČOVÁ, Mariana: Neutron diffraction, inelastic neutron scattering (INS) and DFT study of levoglucosan (1,6-anhydro- β -D-glucopyranose). In: *24th European Crystallographic Meeting*. Marrakech, 2007, P. 64
34. SLÁDKOVIČOVÁ, Mariana – SMRČOK, Ľubomír – MACH, P. – KOLESNIKOV, A. – TUNEGA, D.: INS and DFT study of hydrogen bonding in TRIS. In: *The International Workshop on Dynamics of Molecules and Materials (DMM2007)*. Grenoble, 2007
35. SLÁDKOVIČOVÁ, Mariana – SMRČOK, Ľubomír – MACH, P. – RAMÍREZ CUESTA, A.J. – TUNEGA, D.: INS and DFT study of hydrogen bonding in levoglucosan. In: *The International Workshop on Dynamics of Molecules and Materials (DMM2007)*. Grenoble, 2007
36. SMRČOK, Ľubomír – SCHOLTZOVÁ, Eva: On hydrogen bonding in DMSO and DMSeO-kaolinite intercalates. In: *24th European Crystallographic Meeting*. Marrakech, 2007, P. 73
37. ŠIMKO, František – BOČA, Miroslav: Phase analysis between cryolite and sodium metasilicate. In: *15th European Symposium on Fluoride Chemistry*. Praha, 2007, P. 340
38. ŠUCHA, V. – CZÍMEROVÁ, Adriana – BUJDÁK, Juraj: Surface properties of illite-smectite detected by interactions with rhodamine 6G dye. In: *EUROCLAY 2007*. Aveiro, 2007, P. 260
39. VARGA, Štefan: Grid-free density functional calculations on periodic systems. In: *6th Central European Symposium on Theoretical Chemistry*. Litschau, 2007, P. 18
40. ZHOU, Y. – YOSHIZAWA, Y. – HIRAO, K. – LENČEŠ, Zoltán – ŠAJGALÍK, Pavol: Preparation of β -sialon: Euphosphors by combustion synthesis. In: *2nd International Symposium on Sialons and Non-oxide*. Mie, 2007

AFHA – Abstrakty príspevkov z medzinárodných vedeckých konferencií poriadaných v SR

1. HRACHOVÁ, Jana – KOMADEL, Peter – CHODÁK, I.: Properties of rubber/clay composites. In: *4th International Conference on Nanosciences*. Bratislava, 2007, P. 22
2. KARELL, R. – KRAXNER, J. – CHROMČÍKOVÁ, Mária: Properties of zirconia containing silicate glasses. In: *12th International Conference on Problems of Material Engineering, Mechanics and design*. Jasná, 2007, p. 50
3. KLEMENT, R. – GALUSEK, Dušan – ŠVANČÁREK, Peter: Thermodynamic calculation in the system Al-Si-O(SiC-Al₂O₃). In: *Proceedings of VIIth International Congerence: Preparation of Ceramic Materials*. Herľany, 2007, P. 24-25
4. KOMADEL, Peter – HRACHOVÁ, Jana: Clay minerals used in polymer-clay composites. In: *4th International Conference on Nanosciences*. Bratislava, 2007, P. 21

5. KRAKNER, J. – KLEMENT, R. – LIŠKA, Marek – CHROMČÍKOVÁ, Mária: Formation and stability of foam during melting and fining of glass. In: *12th International Conference on Problems of Material Engineering, Mechanics and design*. Jasná, 2007, p. 51
6. KRAKNER J. – NAĎ, M. – KLEMENT, R. – LIŠKA, Marek: Physicochemical properties of aluminoborosilicate melts in the MgO-CaO-Al₂O₃-B₂O₃-SiO₂ system. In: *Proceedings of VIIth International Congerence: Preparation of Ceramic Materials*. Herľany, 2007, P. 40-41
7. MIKOCZYOVÁ, Monika – GALUSEK, Dušan: Influence of forming method on sinterability of submicrometre alumina. In: *Proceedings of VIIth International Congerence: Preparation of Ceramic Materials*. Herľany, 2007, P. 22-23
8. MIŠÍKOVÁ, L. – LIŠKA, Marek – GALUSKOVÁ, D.: Influence of the corrosion medium flow rates on kinetics of glass dissolution. In: *Proceedings of VIIth International Congerence: Preparation of Ceramic Materials*. Herľany, 2007, P. 44-45
9. ŠVANČÁREK, Peter – GALUSEK, Dušan – KLEMENT, R.: The influence of minority additives on microstructure and properties of Al₂O₃-ZrO₂ composites. In: *Proceedings of VIIth International Congerence: Preparation of Ceramic Materials*. Herľany, 2007, P. 26-27
10. DRÁBIK, Milan: Challenges and limits of thermal analysis in materials chemistry. In: *XXI. International Conference on Coordination and Bioinorganic Chemsitry*. Smolenice, 2007. P. 33

AFHB – Abstrakty príspevkov z domácich konferencií

1. BOČA, Miroslav: Density and molar volume of the melts MF-K₂NbF₇ (MF=LiF-NaF, LiF-KF and NaF-KF). In: *59. Zjazd Chemikov*. Tatranské Matliare, 2007, P. 78
2. HRACHOVÁ, Jana – VARGOVÁ, M. – FAJNOR, V.Š.: Vysokotepelná klasifikácia montmorillonitu „Krupia.” In: *59. Zjazd Chemikov*. Tatranské Matliare, 2007, P. 188
3. KORENKO, Michal: Interfacial tension between aluminum and cryolite melts during electrolysis of the system Na₃AlF₆-AlF₃(NaF)-Al₂O₃. In: *59. Zjazd Chemikov*. Tatranské Matliare, 2007, P. 77
4. KUCHARÍK, Marián: Vysokotepelná neutónová prášková difrakcia sústavy Na₃AlF₆-Al₂O₃. In: *59. Zjazd Chemikov*. Tatranské Matliare, 2007, P. 180
5. NÓGELLOVÁ, Z. – HRACHOVÁ, Jana – CHODÁK, I.: Porovnanie efektivity rôznych plnív na báze montmorillonitu pre termoplastickú a elastomérnu maticu. In: *59. Zjazd Chemikov*. Tatranské Matliare, 2007, P. 198
6. ŠAJGALÍK, Pavol: Nanotechnológie a nanomateriály – pokus o úvod do diskusie. In: *59. Zjazd Chemikov*. Tatranské Matliare, 2007
7. ŠAJGALÍK, Pavol – LENČEŠ, Zoltán: Polymer derived ceramics: Hybrid processing. In: *59. Zjazd Chemikov*. Tatranské Matliare, 2007, P. 245
8. DRÁBIK, Milan: Využitelnosť Portlandských cementov pre syntézy MDF materiálov. In: *59. Zjazd Chemikov*. Tatranské Matliare, 2007, P. 237

AGJ – Autorské osvedčenia, patenty, objavy

1. ŠIMURKA, P. – VRÁBEL, P. – PETRUŠKOVÁ, V. – LIŠKA, Marek – MACHO, V.: Kryštáľové sklo bez olova, bária, nióbu a ich zlúčenín a spôsob prípravy. In: *Patent č. 285523*. 2007

BAA - Odborné monografie vydané v zahraničných vydavateľstvách

1. SCHUMACHER, G. – PRESTON, S. - SMITH, A. - ŠAJGALÍK P.: Future Perspectives of European Materials Research, In *Matter and Materials*. Vol. 35, Forschung Centrum Juelich 2007, ISBN 978-3-89336-447-0, 130 pages.

B DFA – Odborné práce v domácich nekarentovaných časopisoch impaktovaných

1. BUJDÁK, Juraj: Súťažné úlohy chemickej olympiády v kategórii B. Študijné kolo. Úlohy v anorganickej chémii. In: *Chemické rozhľady*. Vol. 2, no. 8, 2007, p. 103-106.

GII – Rôzne publikácie a dokumenty, ktoré nemožno zaradiť do žiadnej z predchádzajúcich kategórií

1. CHOCHOLOUŠEK, J. – CHROMČÍKOVÁ, Mária. Atlas nehomogenít v sklách. In: *Slovenská sklárska spoločnosť*. Trenčín, 2007, (elektronický optický disk)

Ohlasy (citácie)

AQUINO,AJA. – TUNEGA,D. – HABERHAUER,G. – GERZABEK,MH. – LISCHKA,H. A density-functional investigation of aluminium(III)-citrate complexes. In *Physical Chemistry Chemical Physics*. Vol.3, no.11 (2001), p.1979-1985

Citácie z WOS: 1

1. Schaumann GE
JOURNAL OF PLANT NUTRITION AND SOIL SCIENCE 169 (2) 145-156, 2006

AQUINO,AJA. – TUNEGA,D. – HABERHAUER,G. – GERZABEK,MH. – LISCHKA,H. Solvent effects on hydrogen bonds: A theoretical study. In *Journal of Physical Chemistry A*. Vol.106, no.9 (2002), p.1862-1871

Citácie z WOS: 8

2. Wang YH; Zou JW; Lu YX; Yu QS
JOURNAL OF THEORETICAL AND COMPUTATIONAL CHEMISTRY 5 (4) 719-732, 2006
3. Parreira RLT; Valdes H; Galembeck SE
CHEMICAL PHYSICS 331 (1) 96-110, 2006
4. Tian YC; Fang WH
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (41) 11704-11710, 2006
5. Musin RN; Mariam YH
JOURNAL OF PHYSICAL ORGANIC CHEMISTRY 19 (7): 425-444, 2006
6. Ishizaka S; Nishijima Y; Kitamura N
ANALYTICAL AND BIOANALYTICAL CHEMISTRY 386 (3) 749-758, 2006
7. Kwon KD; Vadillo-Rodriguez V; Logan BE; Kubicki JD
GEOCHIMICA ET COSMOCHIMICA ACTA 70 (15) 3803-3819, 2006
8. Roy D; Sunoj RB
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (17) 5942-5947, 2006
9. Ye JW; Zhang P; Ye KQ; Zhang HY; Jiang SM; Ye L; Yang GD; Wang Y
JOURNAL OF SOLID STATE CHEMISTRY 179 (2) 438-449, 2006

AQUINO,AJA. – TUNEGA,D. – HABERHAUER,G. – GERZABEK,MH. – LISCHKA,H. Adsorption of organic substances on broken clay surfaces: A quantum chemical study. In *Journal of Computational Chemistry*. Vol.24, no.15 (2003), p.1853-1863

Citácie z WOS: 4

10. Michalkova A; Martinez J; Zhikol OA; Gorb L; Shishkin OV; Leszczynska D; Leszczynski J
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B 110 (42) 21175-21183, 2006
11. Moreno DV; Ferrera ZS; Rodriguez JJS
JOURNAL OF AGRICULTURAL AND FOOD CHEMISTRY 54 (20) 7747-7752, 2006
12. Kwon KD; Vadillo-Rodriguez V; Logan BE; Kubicki JD
GEOCHIMICA ET COSMOCHIMICA ACTA 70 (15) 3803-3819, 2006
13. Moreno DV; Ferrera ZS; Rodriguez JJS
JOURNAL OF CHROMATOGRAPHY A 1104 (1-2) 11-17, 2006

AQUINO,AJA. – TUNEGA,D. – GERZABEK,MH. – LISCHKA,H. Modeling catalytic effects of clay mineral surfaces on peptide bond formation. In *Journal of Physical Chemistry B*. Vol.108, no.28 (2004), p.10120-10130

Citácie z WOS: 3

14. Rimola A; Sodupe M; Tosoni S; Civalieri B; Ugliengo P
LANGMUIR 22 (15) 6593-6604, 2006
15. Boulet P; Greenwell HC; Stackhouse S; Coveney PV
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM 762 (1-3) 33-48, 2006
16. Schaumann GE
JOURNAL OF PLANT NUTRITION AND SOIL SCIENCE 169 (2) 145-156, 2006

ARBUZNIKOV,AV. – KAUPP,M. – MALKIN,VG. – REVIKINE,R. – MALKINA,OL. Validation study of meta-GGA functionals and of a model exchange-correlation potential in density functional calculations of EPR parameters. In *Physical Chemistry Chemical Physics*. Vol.4, no.22 (2002), p.5467-5474

Citácie z WOS: 4

17. Sinnecker S; Flores M; Lubitz W
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 8 (48) 5659-5670, 2006

18. Zbiri M
INORGANICA CHIMICA ACTA 359 (12) 3865-3870, 2006
 19. Sinnecker S; Neese F
JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY 27 (12) 1463-1475, 2006
 20. Furche F; Perdew JP
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (4) Art. No. 044103, 2006
- ATANASOV,M. – BARRAS,JL. – BENCO,I. – DAUL,C. Electronic structure, chemical bonding, and vibronic coupling in Mn^{IV} / Mn^{III} mixed valent $Li_xMn_2O_4$ spinels and their effect on the dynamics of intercalated Li: A cluster study using DFT. In *Journal of the American Chemical Society*. Vol.122, no.19 (2000), p.4718-4728
Citácie z WOS: 1
21. Wu QH; Thissen A; Jaegermann W
CHINESE PHYSICS LETTERS 23 (8) 2202-2205, 2006
- BARAN,P. – BOČA,M. – BOČA,R. – KRUTOŠÍKOVÁ,A. – MIKLOVIČ,J. – PELIKÁN,J. – TITIŠ,J. Structural characterization, spectral and, magnetic properties of isothiocyanate nickel(II) complexes with furopyridine derivatives. In *Polyhedron*. Vol.24, no.12 (2005), p.1510-1516
Citácie z WOS: 1
22. Hasegawa M; Ishii A; Habu K; Ichikawa H; Maeda K; Kishi S; Shigesato Y
SCIENCE AND TECHNOLOGY OF ADVANCED MATERIALS 7 (1) 72-76, 2006
- BARTLETT,RJ. – NOGA,J. The expectation value coupled-cluster method and analytical energy derivatives. In *Chemical Physics Letters*. Vol.150, no.1-2 (1988), p.29-36
Citácie z WOS: 5
23. Korona T; Jeziorski B
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (18) Art. No. 184109, 2006
 24. Manohar PU; Vaval N, Pal S
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM 768 (1-3) 91-96, 2006
 25. Bunge CF
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (1) Art. No. 014107, 2006
 26. Kowalski K
MOLECULAR PHYSICS 104 (13-14) 1989-1997, 2006
 27. Yanai T; Chan GKL
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (19) Art. No. 194106, 2006
- BARTLETT,RJ. – KUCHARSKI,SA. – NOGA,J. Alternative coupled-cluster ansatz II. The unitary coupled cluster method. In *Chemical Physics Letters*. Vol.155, no.1 (1989), p.133-140
Citácie z WOS: 1
28. Yanai T; Chan GKL
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (19) Art. No. 194106, 2006
- BARTLETT,RJ. – KUCHARSKI,SA. – NOGA,J. – WATTS,JD. – TRUCKS,GW. Some consideration of alternative ansatz in coupled-cluster theory. In *Lecture Notes in Chemistry* Vol.52 (1989), p.125-150
Citácie z WOS: 3
29. Korona T; Jeziorski B
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (18) 184109, 2006
 30. Yanai T; Chan GKL
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (19) 194106, 2006
 31. Wladyslawski M; Nooijen M
ADVANCES IN QUANTUM CHEMISTRY 49 1-101, 2005
- BARTLETT,RJ. – WATTS,JD. – KUCHARSKI,SA. – NOGA,J. Non-iterative fifth-order triple and quadruple excitation energy correction in correlated methods. In *Chemical Physics Letters*. Vol.165, no.6 (1990), p.513-522
Citácie z WOS: 24
32. Gray BR; Lee EPF; Yousef A; Shrestha S; Viehland LA; Wright TG
MOLECULAR PHYSICS 104 (20-21) 3237-3244, 2006
 33. Crawford TD; Abrams ML; King RA; Lane JR; Schofield DP; Kjaergaard HG
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (20) Art. No. 204302, 2006
 34. Lupinetti C; Thakkar AJ
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (19) Art. No. 194317, 2006
 35. Reisenauer HP; Romanski J; Mloston G; Schreiner PR
EUROPEAN JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY (21) 4813-4818, 2006
 36. Kohn A; Olsen J
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (17): Art. No. 174110 NOV 7 2006
 37. Gray BR; Wright TG; Wood EL; Viehland LA
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 8 (41) 4752-4757, 2006

38. Karton A; Rabinovich E; Martin JML; Ruscic B
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (14) Art. No. 144108, 2006
39. Del Bene JE; Alkorta I; Elguero J
CHEMICAL PHYSICS LETTERS 429 (1-3) 23-26, 2006
40. Kerkines ISK; Mavridis A; Karipidis PA
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (37) 10899-10903, 2006
41. Schreiner PR; Fokin AA; Pascal RA; de Meijere A
ORGANIC LETTERS 8 (17) 3635-3638, 2006
42. Wang SY; Yamaguchi Y; Schaefer HF
JOURNAL OF THEORETICAL AND COMPUTATIONAL CHEMISTRY 5 (2) 281-297, 2006
43. Bunge CF
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (1) Art. No. 014107, 2006
44. Sklenak S; Hrusak J
JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION 2 (4) 997-1008, 2006
45. Tersago K; Van Alsenoy C; Woollins JD; Blockhuys F
CHEMICAL PHYSICS LETTERS 423 (4-6) 422-426, 2006
46. Burns LA; Murdock D; Vaccaro PH
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (20) Art. No. 204307, 2006
47. Demel O; Pittner J
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (14) Art. No. 144112, 2006
48. Schreiner PR; Reisenauer HP
CHEMPHYSCHEM 7 (4) 880-885, 2006
49. Crawford TD
THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS 115 (4) 227-245, 2006
50. Sattelmeyer KW; Tubert-Brohman I; Jorgensen WL
JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION 2 (2) 413-419, 2006
51. Vazquez J; Stanton JF
MOLECULAR PHYSICS 104 (3) 377-388, 2006
52. Feller D; Peterson KA; Crawford TD
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (5) Art. No. 054107, 2006
53. Wheeler SE; Yamaguchi Y; Schaefer HF
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (4) Art. No. 044322, 2006
54. Paul A; Yamaguchi Y; Schaefer HF; Peterson KA
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (3) Art. No. 034310, 2006
55. Coriani S; Haaland A; Helgaker T; Jorgensen P
CHEMPHYSCHEM 7 (1) 245-249, 2006

BENCO,Ľ. Chemical bonding at grain boundaries MgO on β - Si_3N_4 . In *Surface Science*. Vol.327, no.3 (1995), p.274-284
Citácie z WOS: 1

56. Ziegler A; Idrobo JC; Cinibulk MK; Kisielowski C; Browning ND; Ritchie RO
APPLIED PHYSICS LETTERS 88 (4) Art. No. 041919, 2006

BENCO,Ľ. – SMRČOK,Ľ. Hartree-Fock study of pressure-induced strengthening of hydrogen bonding in lizardite-1T. In *European Journal of Mineralogy*. Vol.10, no.3 (1998), p.483-490
Citácie z WOS: 3

57. Hilairt N; Daniel I; Reynard B
PHYSICS AND CHEMISTRY OF MINERALS 33 (8-9) 629-637, 2006
58. Auzende AL; Pellenq RJM; Devouard B; Baronnet A; Grauby O
PHYSICS AND CHEMISTRY OF MINERALS 33 (4) 266-275, 2006
59. Reynard B; Wunder B
AMERICAN MINERALOGIST 91 (2-3) 459-462, 2006

BENCO,Ľ. – BARRAS,JL. – ATANASOV,M. – DAUL,CA. – DEISS,E. First-principles prediction of voltages of lithiated oxides for lithium-ion batteries. In *Solid State Ionics*. Vol. 112, no.3-4 (1998), p.255-259
Citácie z WOS: 2

60. Huang ZF; Meng X; Wang CZ; Sun Y; Chen G
JOURNAL OF POWER SOURCES 158 (2) 1394-1400, 2006
61. Ra W; Nakayama M; Cho W; Wakihara M; Uchimoto Y
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 8 (7) 882-889, 2006

BENCO,Ľ. – BARRAS,JL. – ATANASOV,M. – DAUL,C. – DEISS,E. First principles calculation of electrode material for lithium intercalation batteries: TiS_2 and LiTi_2S_4 cubic spinel structures. In *Journal of Solid State Chemistry*. Vol.145, no.2 (1999), p.503-510
Citácie z WOS: 4

62. Selvam P; Tsuboi H; Koyama M; Endou A; Takaba H; Kubo M; Del Carpio CA; Miyamoto A
REVIEWS IN CHEMICAL ENGINEERING 22 (6) 377-470, 2006

63. Bodenez V; Dupont L; Morcrette M; Surcin C; Murphy DW; Tarascon JM
CHEMISTRY OF MATERIALS 18 (18) 4278-4287, 2006
 64. Behrens M; Riemenschneider O; Bensch W; Indris S; Wilkening M; Heitjans P
CHEMISTRY OF MATERIALS 18 (6) 1569-1576, 2006
 65. Li AY; Liu HY; Zhu ZZ; Huang MC; Yang Y
JOURNAL OF MATERIALS SCIENCE & TECHNOLOGY 22 (1) 40-44, 2006
- BENCO,Ľ. – DEMUTH,T. – HAFNER,J. – HUTSCHKA,F. Spontaneous proton transfer between O-sites in zeolites. In *Chemical Physics Letters*. Vol.324, no.5-6 (2000), p.372-379
Citácie z WOS: 1
66. Elanany M; Vercauteren DP; Koyama M; Kubo M; Selvam P; Broclawik E; Miyamoto A
JOURNAL OF MOLECULAR CATALYSIS A 243 (1) 1-7, 2006
- BENCO,Ľ. – DEMUTH,T. – HAFNER,J. – HUTSCHKA,F. Ab initio molecular dynamics simulation of hydration and ion-exchange processes in low Al-zeolites. In *Microporous and Mesoporous Materials*. Vol.42, no.1 (2001), p.1-19
Citácie z WOS: 1
67. Serr A; Netz RR
INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY 106 (14) 2960-2974, 2006
- BENCO,Ľ. – TUNEGA,D. – HAFNER,J. – LISCHKA,H. Orientation of OH groups in kaolinite and dickite: Ab initio molecular dynamics study. In *American Mineralogist*. Vol.86, no.9 (2001), p.1057-1065
Citácie z WOS: 2
68. Leluk K; Orzechowski K; Jerie K; Baranowski A; Slonka T; Glowinski J
ACTA PHYSICA POLONICA A 110 (5) 621-629, 2006
 69. Greenwell HC; Jones W; Coveney PV; Stackhouse S
JOURNAL OF MATERIALS CHEMISTRY 16 (8) 708-723, 2006
- BENCO,Ľ. – TUNEGA,D. – HAFNER,J. – LISCHKA,H. Upper limit of the O-H center dot center dot center dot O hydrogen bond: Ab initio study of the kaolinite structure. In *Journal of Physical Chemistry B*. Vol.105, no.44 (2001), p.10812-10817
Citácie z WOS: 2
70. Butler IS; Frost RL
APPLIED SPECTROSCOPY REVIEWS 41 (5) 449-471, 2006
 71. Vanerek A; Alince B; van de Ven TGM
COLLOIDS AND SURFACES A 273 (1-3) 193-201, 2006
- BENCO,Ľ. – TUNEGA,D. – HAFNER,J. – LISCHKA,H. Ab initio density functional theory applied to the structure and proton dynamics of clays. In *Chemical Physics Letters*. Vol.333, no.6 (2001), p.479-484
Citácie z WOS: 2
72. Boulet P; Greenwell HC; Stackhouse S; Coveney PV
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM 762 (1-3) 33-48, 2006
 73. Kubilay S; Gurkan R; Savran A; Yalcinkaya Z
COLLOID JOURNAL 68 (3) 274-284, 2006
- BENCO,Ľ. – DEMUTH,T. – HAFNER,J. – HUTSCHKA,F. – TOULHOAT,H. Adsorption of linear hydrocarbons in zeolites: A density-functional investigation. In *Journal of Chemical Physics*. Vol.114, no.14 (2001), p.6327-6334
Citácie z WOS: 2
74. Wang SY; Zhong CL
ACTA CHIMICA SINICA 64 (23) 2375-2378, 2006
 75. Milas I; Nascimento MAC
CHEMICAL PHYSICS LETTERS 418 (4-6) 368-372, 2006
- BENCO,Ľ. – DEMUTH,T. – HAFNER,J. – HUTSCHKA,F. – TOULHOAT,H. Extra-framework aluminum species in zeolites: Ab initio molecular dynamics simulation of gmelinite. In *Journal of Catalysis*. Vol.209, no.2 (2002), p.480-488
Citácie z WOS: 1
76. Dimitrijevic R; Lutz W; Ritzmann A
JOURNAL OF PHYSICS AND CHEMISTRY OF SOLIDS 67 (8) 1741-1748, 2006
- BENCO,Ľ. – HAFNER,J. – LENCĚŠ,Z. – ŠAJGALÍK,P. Electronic structure and bulk properties of β -SiAlONs. In *Journal of the American Ceramic Society*. Vol.86, no.7 (2003), p.1162-1167
Citácie z WOS: 1
77. Alcala MD; Criado JM; Gotor FJ; Real C
JOURNAL OF MATERIALS SCIENCE 41 (7) 1933-1938, 2006
- BENCO,Ľ. – HAFNER,J. – HUTSCHKA,F. – TOULHOAT,H. Physisorption and chemisorption of some *n*-Hydrocarbons at the brønsted acid site in zeolites 12-membered ring main channels: Ab initio study of the gmelinite structure. In *Journal of Physical Chemistry B*. Vol.107, no.36 (2003), p.9756-9762

Citácie z WOS 2:

78. Fujita H; Kanougi T; Atoguchi T
APPLIED CATALYSIS A 313 (2) 160-166, 2006
79. Janik MJ; Davis RJ; Neurock M
CATALYSIS TODAY 116 (2) 90-98, 2006

BENCO,Ľ. – BUČKO,T. – HAFNER,J. – TOULHOAT,H. Ab initio simulation of Lewis sites in mordenite and comparative study of the strength of active sites via CO adsorption. In *Journal of Physical Chemistry B*. Vol.108, no.36 (2004), p.13656-13666

Citácie z WOS: 1

80. Cheung P; Bhan A; Sunley GJ; Iglesia E
ANGEWANDTE CHEMIE 45 (10) 1617-1620, 2006

BENCO,Ľ. – BUČKO,T. – HAFNER,J. – TOULHOAT,H. A DFT study of adsorption and chemisorption of H₂ on lewis sites in mordenite. In *Journal of Physical Chemistry B*. Vol.109, no.47 (2005), p.22491-22501

Citácie z WOS: 3

81. Aleksandrov HA; Vayssilov GN; Rosch N
JOURNAL OF MOLECULAR CATALYSIS A 256 (1-2) 149-155, 2006
82. Torres FJ; Civalieri B; Pisani C; Ugliengo P
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B 110 (21) 10467-10474, 2006
83. Nachtigall P; Garrone E; Palomino GT; Delgado MR; Nachtigallova D; Areal CO
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 8 (19) 2286-2292, 2006

BENEDICT,H. – SHENDEROVICH,IG. – MALKINA,OL. – MALKIN,VG. – DENISOV, GS. – GOLUBEV,NS. – LIMBACH,HH. Nuclear scalar spin-spin couplings and geometries of hydrogen bonds. In *Journal of the American Chemical Society*. Vol.122, no.9 (2000), p. 1979-1988

Citácie z WOS: 6

84. van Mourik T
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (19) Art. No. 191101, 2006
85. Cornish PV; Giedroc DP; Hennig M
JOURNAL OF BIOMOLECULAR NMR 35 (3) 209-223, 2006
86. Ding SW; Hong YW; Chen CY; Chang NC
BIOPHYSICAL CHEMISTRY 121 (2) 75-83, 2006
87. Ziolkowski M; Grabowski SJ; Leszczynski J
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (20) 6514-6521, 2006
88. Alkorta L; Picazo O; Elguero J
CURRENT ORGANIC CHEMISTRY 10 (7) 695-714, 2006
89. Afonin AV; Ushakov IA; Sobenina LN; Stepanova ZV; Petrova OV; Trofimov BA
MAGNETIC RESONANCE IN CHEMISTRY 44 (1) 59-65, 2006

BISHOP,J. – MADEJOVÁ,J. – KOMADEL,P. – FROSCHL,H. The influence of structural Fe, Al and Mg on the infrared OH bands in spectra of dioctahedral smectites. In *Clay Minerals*. Vol.37 no.4 (2002), p.607-616

Citácie z WOS: 1

90. Christidis GE
AMERICAN MINERALOGIST 91 (4) 685-701, 2006

BLUDSKÝ,O. – SILHAN,M. – NACHTIGALL,P. – BUČKO,T. – BENCO,Ľ. – HAFNER,J. Theoretical investigation of CO interaction with copper sites in zeolites: periodic DFT and hybrid quantum mechanical/ interatomic potential function study. In *Journal of Physical Chemistry B*. Vol.109, no.19 (2005), p.9631-9638

Citácie z WOS: 3

91. Sirijaraensre J; Limtrakul J
CHEMPHYSICHEM 7 (11) 2424-2432, 2006
92. Jardillier N; Villagomez EA; Delahay G; Coq B; Berthomieu D
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B 110 (33) 16413-16421, 2006
93. Plant DF; Maurin G; Deroche I; Gaberova L; Llewellyn PL
CHEMICAL PHYSICS LETTERS 426 (4-6) 387-392, 2006

BOČA,M. – BARAN,P. – BOČA,R. – FUESS,H. – KICKELBICK,G. – LINERT,W. – RENZ,F. – SVOBODA,I. Selective imidazolidine ring opening during complex formation of iron(III), copper(II), and zinc(II) with a multidentate ligand obtained from 2-pyridinecarboxaldehyde N-oxide and triethylenetetramine. In *Inorganic Chemistry*. Vol.39, no.15 (2000), p.3205-3212

Citácie z WOS: 3

94. Mandal D; Wu AQ; Guo GC; Ray D
INORGANIC CHEMISTRY 45 (22) 8826-8828, 2006
95. Nienkemper K; Kotov VV; Kehr G; Erker G; Frohlich R
EUROPEAN JOURNAL OF INORGANIC CHEMISTRY (2) 366-379, 2006

96. Nanda PK; Mandal D; Ray D
POLYHEDRON 25 (3) 702-710, 2006
- BOČA,M. – VALIGURA,D. – LINERT,W. NMR study of new ligands as products of condensation of 2-pyridinecarboxaldehyde-N-oxide with polyamines. In *Tetrahedron*. Vol.56, no.3 (2000), p-441-446
Citácie z WOS: 2
97. Kolarz BN; Jakubiak A; Jezierska J
POLIMERY 51 (7-8) 561-570, 2006
 98. Nienkemper K; Kotov VV; Kehr G; Erker G; Frohlich R
EUROPEAN JOURNAL OF INORGANIC CHEMISTRY (2) 366-379, 2006
- BOČA,M. – BOČA,R. – KICKELBICK,G. – LINERT,W. – SVOBODA,I. – FUESS,H. Novel complexes of 2,6-bis(benzthiazol-2-yl)pyridine. In *Inorganica Chimica Acta*. Vol.338 (2002), p.36-50
Citácie z WOS: 2
99. Okamoto K; Kanbara T; Yamamoto T; Wada A
ORGANOMETALLICS 25 (16) 4026-4029, 2006
 100. Yue SM; Xu HB; Ma JF; Su ZM; Kan YH; Zhang HJ
POLYHEDRON 25 (3) 635-644, 2006
- BOČA,M. – VALKO,M. – KICKELBICK,G. – ĎURÍK,M. – LINERT,W. Cu^{II} complexes with the new Schiff base ligands as a mono- and bis-condensation products of 2-pyridinecarboxaldehyde-N-oxide with diethylenetriamine. In *Inorganica Chimica Acta*. Vol.349 (2003), p.111-122
Citácie z WOS: 2
101. Chen ZF; Tang YZ
JOURNAL OF COORDINATION CHEMISTRY 59 (2) 207-214, 2006
 102. Nienkemper K; Kotov VV; Kehr G; Erker G; Frohlich R
EUROPEAN JOURNAL OF INORGANIC CHEMISTRY (2) 366-379, 2006
- BOČA,M. – KICKELBICK,G. – FUESS,H. The presence of iron(III) salts of oxo acids can result in protonation of amino groups. In *Chemical Papers – Chemické zvesti*. Vol.58, no.2 (2004), p.145-147
Citácie z WOS: 1
103. Nienkemper K; Kotov VV; Kehr G; Erker G; Frohlich R
EUROPEAN JOURNAL OF INORGANIC CHEMISTRY (2) 366-379, 2006
- BOČA,M. – FUESS,H. – IVANOVÁ,Z. Systems of potassium oxofluorotantalates. In *Chemical Papers – Chemické zvesti*. Vol.59, no.5-6 (2005), p.304-309
Citácie z WOS: 1
104. Kosa L; Mackova I
THERMOCHIMICA ACTA 447 (2) 209-211, 2006
- BOČA,R. – BOČA,M. – DLHÁŇ,L. – FALK,K. – FUESS,H. – HAASE,W. – JAROŠČIAK, R. – PAPÁNKOVÁ,B. – RENZ,F. – VRBOVÁ,M. – WERNER,R. Strong cooperativeness in the mononuclear iron(II) derivative exhibiting an abrupt spin transition above 400 K. In *Inorganic Chemistry*. Vol.40, no.13 (2001), p.3025-3033
Citácie z WOS: 5
105. Rajadurai C; Schramm F; Brink S; Fuhr O; Ghafari M; Kruk R; Ruben M
INORGANIC CHEMISTRY 45 (25) 10019-10021, 2006
 106. Kuang XY; Cheng L
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (39) 11353-11358, 2006
 107. Yamada M; Hagiwara H; Torigoe H; Matsumoto N; Kojima M; Dahan F; Tuchagues JP; Re N; Iijima S
CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL 12 (17) 4536-4549, 2006
 108. Sorai M; Nakano M; Miyazaki Y
CHEMICAL REVIEWS 106 (3) 976-1031, 2006
 109. Yue SM; Xu HB; Ma JF; Su ZM; Kan YH; Zhang HJ
POLYHEDRON 25 (3) 635-644, 2006
- BOČA,R. – BOČA,M. – EHRENBERG,H. – FUESS,H. – LINERT,W. – RENZ,F. – SVOBODA,I. Spin crossover in iron(II) tris(2-(2'-pyridyl)benzimidazole) complex monitored by variable temperature methods: synchrotron powder diffraction, DSC, IR spectra, Mossbauer spectra, and magnetic susceptibility. In *Chemical Physics*. Vol.293, no.3 (2003), p.375-395
Citácie z WOS: 1
110. Tornroos KW; Hostettler M; Chernyshov D; Vangdal B; Burgi HB
CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL 12 (24) 6207-6215, 2006
- BOČA,R. – BOČA,M. – GEMBICKÝ,M. – JÄGER,L. – WAGNER,C. – FUESS,H. Versatile coordination mode of dicyanamide in nickel(II) complexes containing polyamines as blocking ligands. In *Polyhedron*. Vol.23, no.15 (2004), p.2337-2348
Citácie z WOS: 4

111. Dobrzynska D; Jerzykiewicz LB; Duczmal M; Wojciechowska A; Jablonska K; Palus J; Ozarowski A
INORGANIC CHEMISTRY 45 (26) 10479-10486, 2006
 112. Du M; Wang Q; Wang Y; Zhao XJ; Ribas J
JOURNAL OF SOLID STATE CHEMISTRY 179 (12) 3926-3936, 2006
 113. Hsu GY; Misra P; Cheng SC; Wei HH; Mohanta S
POLYHEDRON 25 (17) 3393-3398, 2006
 114. Armentano D; De Munno G; Guerra F; Julve M; Lloret F
INORGANIC CHEMISTRY 45 (12) 4626-4636, 2006
- BREEN,C. – MADEJOVÁ,J. – KOMADEL,P. Correlation of catalytic activity with infrared, ²⁹Si MAS NMR and acidity data for HCL-treated fine fractions of montmorillonites. In *Applied Clay Science*. Vol.10, no.3 (1995), p.219-230
Citácie z WOS: 2
115. Teng MY; Lin SH
DESALINATION 201 (1-3) 71-81, 2006
 116. Teng MY; Lin SH
DESALINATION 194 (1-3) 156-165, 2006
- BREEN,C. – MADEJOVÁ,J. – KOMADEL,P. Characterization of moderately acid-treated, size-fractionated montmorillonites using IR and MAS NMR spectroscopy and thermal analysis. In *Journal of Materials Chemistry*. Vol.5, no.3 (1995), p.469-474
Citácie z WOS: 2
117. Teng MY; Lin SH
DESALINATION 194 (1-3) 156-165, 2006
 118. Okada K; Arimitsu N; Karneshima Y; Nakajima A; MacKenzie KJD
APPLIED CLAY SCIENCE 31 (3-4) 185-193, 2006
- BREEN,C. – ZAHOR,FD. – MADEJOVÁ,J. – KOMADEL,P. Characterization and catalytic activity of acid-treated, size-fractionated smectites. In *Journal of Physical Chemistry B*. Vol.101, no.27 (1997), p.5324-5331
Citácie z WOS: 2
119. Vukovic Z; Milutonic A; Rozic L; Rosic A; Nedic Z; Jovanovic D
CLAYS AND CLAY MINERALS 54 (6) 697-702, 2006
 120. Mravcakova M; Omastova M; Potschke P; Pozsgay A; Pukanszky B; Pionteck J
POLYMERS FOR ADVANCED TECHNOLOGIES 17 (9-10) 715-726, 2006
- BREEN,C. – WATSON,R. – MADEJOVÁ,J. – KOMADEL,P. – KLAPYTA,Z. Acid-activated organoclays: Preparation, characterization and catalytic activity of acid-treated tetra-alkylammonium exchanged smectites. In *Langmuir*. Vol.13, no.24 (1997), p.6473-6479
Citácie z WOS: 1
121. Klopogge JT
APPLIED CLAY SCIENCE 31 (3-4) 165-179, 2006
- BREEN,C. – LAST,PM. – TAYLOR,S. – KOMADEL,P. Synergic chemical analysis - the coupling of TG with FTIR, MS and GC-MS. 2. Catalytic transformation of the gases evolved during the thermal decomposition of HDPE using acid-activated clays. In *Thermochimica Acta*. Vol.363, no.1-2 (2000), p.93-104
Citácie z WOS: 2
122. Li J; Wang ZY; Yang X; Hu L; Liu YW; Wang CX
THERMOCHIMICA ACTA 447 (2) 147-153, 2006
 123. Miskolczi N; Bartha L; Deak G
POLYMER DEGRADATION AND STABILITY 91 (3) 517-526, 2006
- BUČKO,T. – BENCO,L. – HAFNER,J. Defect sites at the (001) surface of mordenite: An ab initio study. In *Journal of Chemical Physics*. Vol.118, no.18 (2003), p.8437-8445
Citácie z WOS: 1
124. Bromley ST; Moreira IDPR; Illas F; Wojdel JC
PHYSICAL REVIEW B 73 (13) Art. No. 134202, 2006
- BUČKO,T. – HAFNER,J. – BENCO,L. Adsorption and vibrational spectroscopy of ammonia at mordenite: Ab initio study. In *Journal of Chemical Physics*. Vol.120, no.21 (2004), p.10263-10277
Citácie z WOS: 3
125. Viswanadham N; Dixit L; Gupta JK; Garg MO
JOURNAL OF MOLECULAR CATALYSIS A 258 (1-2) 15-21, 2006
 126. Gualtieri AF; Passaglia E
EUROPEAN JOURNAL OF MINERALOGY 18 (3) 351-359, 2006
 127. Elanany M; Vercauteren DP; Koyama M; Kubo M; Selvam P; Broclawik E; Miyamoto A
JOURNAL OF MOLECULAR CATALYSIS A 243 (1) 1-7, 2006

BUČKO,T. – HAFNER,J. – BENCO,L. Active sites for the vapor phase Beckmann rearrangement over mordenite: An ab initio study. In *Journal of Physical Chemistry A*. Vol.108, no.51 (2004), p.11388-11397

Citácie z WOS: 4

128. Sirijaraensre J; Limtrakul J
CHEMPHYSCHEM 7 (11) 2424-2432, 2006
129. Marthala VRR; Jiang YJ; Huang J; Wang W; Glaser R; Hunger M
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 128 (46) 14812-14813, 2006
130. Fernandez AB; Marinas A; Blasco T; Fornes V; Corma A
JOURNAL OF CATALYSIS 243 (2) 270-277, 2006
131. Jardillier N; Berthomieu D; Goursot A; Reveles JU; Koster AM
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B 110 (37) 18440-18446, 2006

BUČKO,T. – HAFNER,J. – BENCO,L. Adsorption and vibrational spectroscopy of CO on mordenite: Ab initio density-functional study. In *Journal of Physical Chemistry B*. Vol.109, no.15 (2005), p.7345-7357

Citácie z WOS: 1

132. Rimola A; Sodupe M; Tosoni S; Civalieri B; Ugliengo P
LANGMUIR 22 (15) 6593-6604, 2006

BUJDÁK,J. – RODE,BM. The effect of smectite composition on peptide bond formation catalysis. In *Journal of Molecular Evolution*. Vol.43 (1996), p.326-333

Citácie z WOS: 1

133. Abel DL; Trevors JT
PHYSICS OF LIFE REVIEWS 3 (4) 211-228, 2006

Iné citácie: 1

134. Adams JM; McCabe RW
CLAY MINERALS AS CATALYSTS-HANDBOOK OF CLAY SCIENCE, 2006

BUJDÁK,J. – RODE,BM. Silica, alumina, and clay-catalyzed alanine peptide bond formation. In *Journal of Molecular Evolution*. Vol.45, no.5 (1997), p.457-466

Citácie z WOS: 2

135. Rimola A; Sodupe M; Tosoni S; Civalieri B; Ugliengo P
LANGMUIR 22 (15) 6593-6604, 2006
136. Contreras-Torres FF; Basiuk VA
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (23) 7431-7440, 2006

Iné citácie: 2

137. Brack A
CLAY MINERALS AND THE ORIGIN OF LIFE-HANDBOOK OF CLAY SCIENCE, 2006
138. Adams JM; McCabe RW
CLAY MINERALS AS CATALYSTS-HANDBOOK OF CLAY SCIENCE, 2006

BUJDÁK,J. – KOMADEL,P. Interaction of methylene blue with reduced charge montmorillonite. In *Journal of Physical Chemistry B*. Vol.101, no.44 (1997), p.9065-9068

Citácie z WOS: 2

139. Petit S; Righl D; Madejova J
APPLIED CLAY SCIENCE 34 (1-4) 22-30, 2006
140. Gurses A; Dogar C; Yalcin M; Acikyildiz M; Bayrak R; Karaca S
JOURNAL OF HAZARDOUS MATERIALS 131 (1-3) 217-228, 2006

Iné citácie: 1

141. Gates WP
X-ray ABSORPTION SPECTROSCOPY-HANDBOOK OF CLAY SCIENCE, 2006

BUJDÁK,J. – RODE,BM. Glycine oligomerization on silica and alumina. In *Reaction Kinetics and Catalysis Letters*. Vol.62, no.2 (1997), p.281-286

Citácie z WOS: 1

142. Rimola A; Sodupe M; Tosoni S; Civalieri B; Ugliengo P
LANGMUIR 22 (15) 6593-6604, 2006

BUJDÁK,J. – JANEK,M. – MADEJOVÁ,J. – KOMADEL,P. Influence of the layer charge density of smectites on the interaction with methylene blue. In *Journal of the Chemical Society-Faraday Transactions*. Vol.94, no.23 (1998), p.3487-3492

Citácie z WOS: 1

143. Ratnac KR; Gilbert RG; Ye L; Jones AS; Ringer SP
POLYMER 47 (18) 6337-6361, 2006

Iné citácie: 1

144. Lagaly G; Ogawa M; Dékány I
CLAY MINERAL ORGANIC INTERACTION-HANDBOOK OF CLAY SCIENCE, 2006

BUJDÁK,J. – RODE,BM. The effect of clay structure on peptide bond formation catalysis. In *Journal of Molecular Catalysis A*. Vol. 144, no.1 (1999), p.129-136

Citácie z WOS: 1

145. Muller AWJ; Schulze-Makuch D
PHYSICA A 362 (2) 369-381, 2006

Iné citácie: 1

146. Adams JM; McCabe RW
CLAY MINERALS AS CATALYSTS-HANDBOOK OF CLAY SCIENCE, 2006

BUJDÁK,J. – RODE,BM. Silica, alumina and clay catalyzed peptide bond formation: Enhanced efficiency of alumina catalyst. In *Origins of Life and Evolution of the Biosphere*. Vol.29, no.5 (1999), p.451-461

Citácie z WOS: 3

147. Zhong L; Xiao HL; Li C
JOURNAL OF CATALYSIS 243 (2) 442-445, 2006
148. Ramachandran E; Natarajan S
CRYSTAL RESEARCH AND TECHNOLOGY 41 (4) 411-415, 2006
149. Schmidt P
ORIGINS OF LIFE AND EVOLUTION OF THE BIOSPHERE 36 (4) 391-411, 2006

BUJDÁK,J. – HACKETT,E. – GIANNELIS,EP. Effect of layer charge on the intercalation of poly(ethylene oxide) in layered silicates: Implications on nanocomposite polymer electrolytes. In *Chemistry of Materials*. Vol.12, no.8 (2000), p.2168-2174

Citácie z WOS: 22

150. Stefanescu EA; Schexnailder PJ; Dundigalla A; Negulescu II; Schmidt G
POLYMER 47 (21) 7339-7348, 2006
151. Hikosaka MY; Pulcinelli SH; Santilli CV; Dahmouche K; Craievich AF
JOURNAL OF NON-CRYSTALLINE SOLIDS 352 (32-35) 3705-3710, 2006
152. Fang ZP; Xu YZ; Tong LF
JOURNAL OF MATERIALS SCIENCE 41 (17) 5433-5440, 2006
153. Sikdar D; Katti DR; Katti KS
LANGMUIR 22 (18) 7738-7747, 2006
154. Sutton R; Spósito G
GEOCHIMICA ET COSMOCHIMICA ACTA 70 (14) 3566-3581, 2006
155. Lagaly G; Ziesmer S
COLLOID AND POLYMER SCIENCE 284 (9) 947-956, 2006
156. Boulet P; Greenwell HC; Stackhouse S; Coveney PV
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM 762 (1-3) 33-48, 2006
157. Sanchez A; Echeverria Y; Torres CMS; Gonzalez G; Benavente E
MATERIALS RESEARCH BULLETIN 41 (6) 1185-1191 JUN, 2006
158. Wang JC; Chen YH; Jin QQ
HIGH PERFORMANCE POLYMERS 18 (3) 325-340, 2006
159. Wang JC, Chen YH, Jin QQ
JOURNAL OF ADHESION 82 (4): 389-405 APR 2006
160. Taviot-Gueho C; Leroux F
LAYERED DOUBLE HYDROXIDES STRUCTURE AND BONDING 119 121-159, 2006
161. Wang JC; Chen YH; Jin QQ
JOURNAL OF ADHESION SCIENCE AND TECHNOLOGY 20 (2-3) 261-276, 2006
162. Stefanescu EA; Dundigalla A; Ferreira V; Loizou E; Porcar L; Negulescu I; Garino J; Schmidt G
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 8 (14) 1739-1746, 2006
163. Greenwell HC; Bowden AA; Chen BQ; Boulet P; Evans JRG; Coveney PV; Whiting A
JOURNAL OF MATERIALS CHEMISTRY 16 (11) 1082-1094, 2006
164. Greenwell HC; Jones W; Coveney PV; Stackhouse S
JOURNAL OF MATERIALS CHEMISTRY 16 (8) 708-723, 2006
165. Moreno M; Benavente E; Gonzalez G; Lavayen V; Torres CMS
MOLECULAR CRYSTALS AND LIQUID CRYSTALS 448 123-131, 2006
166. Kao HM; Chao SW; Chang PC
MACROMOLECULES 39 (3) 1029-1040, 2006
167. Zhang ZJ; Zhang LN; Li Y; Xu HD
JOURNAL OF APPLIED POLYMER SCIENCE 99 (5) 2273-2278, 2006
168. Banerjee IA; Regan MR
MATERIALS LETTERS 60 (7) 915-918, 2006
169. Deng YJ; Dixon JB; White GN
COLLOID AND POLYMER SCIENCE 284 (4) 347-356, 2006
170. Ni P; Wang QL; Li J; Suo JS; Li SB
JOURNAL OF APPLIED POLYMER SCIENCE 99 (1) 6-13, 2006
171. Moreno M; Benavente E; Gonzalez G; Lavayen V; Torres CMS
MOLECULAR CRYSTALS AND LIQUID CRYSTALS 448 123-131, 2006

Iné citácie: 1

172. Lagaly G; Ogawa M; Dékány I
CLAY MINERAL ORGANIC INTERACTIONS-HANDBOOK OF CLAY SCIENCE, 2006
- BUJDÁK, J. – RODE, B.M. Activated alumina as an energy source for peptide bond formation: Consequences for mineral-mediated prebiotic processes. In *Amino Acids*. Vol. 21, no.3 (2001), p.281-291
Citácie z WOS: 1
173. Guo LH; Meng M; Zha YQ
CHINESE JOURNAL OF CATALYSIS 27 (2) 189-194, 2006
- BUJDÁK, J. – JANEK, M. – MADEJOVÁ, J. – KOMADEL, P. Methylene blue interactions with reduced-charge smectites. In *Clays and Clay Minerals*. Vol.49, no.3 (2001), p.244-254 Citácie z WOS: 1
174. Gupta VK; Mohan D; Saini VK
JOURNAL OF COLLOID AND INTERFACE SCIENCE 298 (1) 79-86, 2006
- Iné citácie: 2
175. Heller-Kallai L
THERMALLY MODIFIED CLAY MINERALS-HANDBOOK OF CLAY SCIENCE, 2006
176. Gates WP
X-ray ABSORPTION SPECTROSCOPY-HANDBOOK OF CLAY SCIENCE, 2006
- BUJDÁK, J. – IYI, N. – FUJITA, T. The aggregation of methylene blue in montmorillonite dispersions. In *Clay Minerals*. Vol.37, no.1 (2002), p.121-133
Citácie z WOS: 2
177. Kaliteevskaya EN; Krutyakova VP; Razumova TK
OPTICS AND SPECTROSCOPY 100 (2) 300-306, 2006
178. Takezawa Y; Imai H
SMALL 2 (3) 390-393, 2006
- BUJDÁK, J. – IYI, N. – HROBÁRIKOVÁ, J. – FUJITA, T. Aggregation and decomposition of a pseudisocyanine dye in dispersions of layered silicates. In *Journal of Colloid and Interface Science*. Vol.247, no.2 (2002), p.494-503,
Citácie z WOS: 2
179. Petit S; Righl D; Madejova J
APPLIED CLAY SCIENCE 34 (1-4) 22-30, OCT 2006
180. Zhang YL; Peng AD; Wang J; Yang WS; Yao JN
JOURNAL OF PHOTOCHEMISTRY AND PHOTOBIOLOGY A 181 (1), 94-98, 2006
- Iné citácie: 1
181. Lagaly G; Ogawa M; Dékány I
CLAY MINERAL ORGANIC INTERACTIONS-HANDBOOK OF CLAY SCIENCE, 2006
- BUJDÁK, J. – RODE, B.M. Preferential amino acid sequences in alumina-catalyzed peptide bond formation. In *Journal of Inorganic Biochemistry*. Vol.90, no.1-2 (2002), p.1-7
Citácie z WOS: 1
182. Xin L; Ma YL; Liu YN; Yan Q; Wang KJ
BIOPOLYMERS 81 (1) 1-7, 2006
- BUJDÁK, J. – IYI, N. Visible spectroscopy of cationic dyes in dispersions with reduced-charge montmorillonites. In *Clays and Clay Minerals*. Vol.50 (2002), p.446-454
Citácie z WOS: 2
183. Gupta VK; Mohan D; Saini VK
JOURNAL OF COLLOID AND INTERFACE SCIENCE 298 (1) 79-86, 2006
184. Gandara F; Lopez-Arbeloa F; Ruiz-Hitzky E; Camblor MA
JOURNAL OF MATERIALS CHEMISTRY 16 (18) 1765-1771, 2006
- BUJDÁK, J. – IYI, N. – KANEKO, Y. – SASAI, R. Molecular orientation of methylene blue cations adsorbed on clay surfaces. In *Clay Minerals*. Vol.38, no.4 (2003), p.561-572
Citácie z WOS: 1
185. Gupta VK; Mohan D; Saini VK
JOURNAL OF COLLOID AND INTERFACE SCIENCE 298 (1) 79-86, 2006
- Iné citácie: 1
186. Lagaly G; Ogawa M; Dékány I.
CLAY MINERAL ORGANIC INTERACTIONS-HANDBOOK OF CLAY SCIENCE, 2006
- BUJDÁK, J. – IYI, N. – KANEKO, Y. – CZÍMEROVÁ, A. – SASAI, R. Molecular arrangement of rhodamine 6G cations in the films of layered silicates: the effect of the layer charge. In *Physical Chemistry Chemical Physics*. Vol.5, no.20 (2003), p.4680-4685
Citácie z WOS: 3
187. Petit S; Righl D; Madejova J
APPLIED CLAY SCIENCE 34 (1-4) 22-30, 2006

188. Arbeloa FL; Martinez VM
JOURNAL OF PHOTOCHEMISTRY AND PHOTOBIOLOGY A 181 (1) 44-49, 2006
 189. Tleugabulova D; Brennan JD
LANGMUIR 22 (4) 1852-1857, 2006
- BUJDÁK,J. – RODE,BM. Alumina catalyzed reactions of amino acids. In *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*. Vol.73, no.3 (2003), p.797-805
Citácie z WOS: 1
190. Li BG; Hu Y; Chen ZY
CHINESE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 19 (3) 253-258, 2006
- BUJDÁK,J. – IYI,N. – SASAI,R. Spectral properties, formation of dye molecular aggregates, and reactions in rhodamine 6G/layered silicate dispersions. In *Journal of Physical Chemistry B*. Vol.108, no.14 (2004), p.4470-4477
Citácie z WOS: 2
191. Gehlen MH; Pereira RV; Gallas MR; Costa TMH; Stefani V
JOURNAL OF PHOTOCHEMISTRY AND PHOTOBIOLOGY A 181 (2-3) 147-151, 2006
 192. Gavrilenko VI; Noginov MA
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (4) Art. No. 044301, 2006
- BUJDÁK,J. – REMKO,M. – RODE,BM. Selective adsorption and reactivity of dipeptide stereoisomers in clay mineral suspension. In *Journal of Colloid And Interface Science*. Vol.294, no.2 (2006), p.304-308.
Citácie z WOS: 1
193. Abel DL; Trevors JT
PHYSICS OF LIFE REVIEWS 3 (4) 211-228, 2006
- BULIČ,FI. – KORB,G. – ŠAJGALÍK,P. – LENČEŠ,Z. Gradient structures in SiAlON's for improved cutting performance. In *Key Engineering Materials*. Vol.264-268 (2004), p.901-904
Citácie z WOS: 1
194. Acikbas NC; Suvaci E; Mandal H
JOURNAL OF THE AMERICAN CERAMIC SOCIETY 89 (10) 3255-3257, 2006
- BÜHL,M. – MALKINA,OL. – MALKIN,VG. Computations of ⁵⁷Fe chemical shifts with the SOS-DFPT method. In *Helvetica Chimica Acta*. Vol.79, no.3 (1996), p.742-754
Citácie z WOS: 1
195. Zbiri M
INORGANICA CHIMICA ACTA 359 (12) 3865-3870, 2006
- BÜHL,M. – KAUPP,M. – MALKINA,OL. – MALKIN,VG. The DFT route to NMR chemical shifts. In *Journal of Computational Chemistry*. Vol.20, no.1 (1999), p.91-105
Citácie z WOS: 20
196. Murakhtina T; Heuft J; Meijer EJ; Sebastiani D
CHEMPHYSCHEM 7 (12) 2578-2584, 2006
 197. Zverev VV; Kovalenko VI
RUSSIAN JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY 80 (1) 99-105, 2006
 198. Pittalis S; Kurth S; Helbig N; Gross EKV
PHYSICAL REVIEW A 74 (6) Art. No. 062511, 2006
 199. Claramunt RM; Lopez C; Maria MDS; Sanz D; Elguero J
PROGRESS IN NUCLEAR MAGNETIC RESONANCE SPECTROSCOPY 49 (3-4) 169-206, 2006
 200. Schmidt J; Hoffmann A; Spiess HW; Sebastiani D
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B 110 (46) 23204-23210, 2006
 201. Abildgaard J; Hansen PE; Josephsen J; Hansen BKV; Sorensen HO; Larsen S
INORGANICA CHIMICA ACTA 359 (14) 4493-4502, 2006
 202. Autschbach J; Zheng SH
MAGNETIC RESONANCE IN CHEMISTRY 44 (11) 989-1007, 2006
 203. Straka M; Vaara J
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (44) 12338-12341, 2006
 204. Boyd M; Hay MP; Boyd PDW
MAGNETIC RESONANCE IN CHEMISTRY 44 (10) 948-954, 2006
 205. Koch R; Bruhn T
JOURNAL OF MOLECULAR MODELING 12 (5) 723-729, 2006
 206. Wiitala KW; Hoyer TR; Cramer CJ
JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION 2 (4) 1085-1092, 2006
 207. Corminboeuf C; Tran F; Weber J
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM 762 (1-3) 1-7, 2006
 208. Murata M; Murata Y; Komatsu K
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 128 (24) 8024-8033, 2006

209. Ocampo C; Aleman C; Curco D; Casanovas J
SYNTHETIC METALS 156 (7-8) 602-609, 2006
 210. Sterzel M; Autschbach J
INORGANIC CHEMISTRY 45 (8) 3316-3324, 2006
 211. Gracia J; Poblet JM; Autschbach J; Kazansky LP
EUROPEAN JOURNAL OF INORGANIC CHEMISTRY (6) 1139-1148, 2006
 212. Sharif S; Denisov GS; Toney MD; Limbach HH
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 128 (10) 3375-3387, 2006
 213. Kurdziel K; Olejniczak S; Okruszek A; Glowiak T; Kruszyński R; Materazzi S; Potrzebowski MJ
JOURNAL OF ORGANOMETALLIC CHEMISTRY 691 (5) 869-878, 2006
 214. Raynaud C; Maron L; Daudey JP; Jolibois F
CHEMPHYSCHEM 7 (2) 407-413, 2006
 215. Sebastiani D
CHEMPHYSCHEM 7 (1) 164-175, 2006
- CÁRSKY,P. – BARTLETT,RJ. – FITZGERALD,G. – NOGA,J. – SPIRKO,V. Ab initio calculations on the energy of activation and tunneling in the automerization of cyclobutadiene. In *Journal of Chemical Physics*. Vol.89, no.5 (1988), p.3008-3015
Citácie z WOS: 1
216. Eckert-Maksic M; Vazdar M; Barbatti M; Lischka H; Maksic ZB
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (6) Art. No. 064310, 2006
- CIBULKOVÁ,J. – CHRENKOVÁ,M. – BOČA,M. Density of the system $KF + K_2NbF_7 + Nb_2O_5$. In *Journal of Chemical and Engineering Data*. Vol.50, no.2 (2005), p.477-480
Citácie z WOS: 1
217. Kubiková B; Daněk V; Gaune-Escard M
ZEITSCHRIFT FÜR PHYSIKALISCHE CHEMIE 220 (6) 765-773, 2006
- CZÍMEROVÁ,A. – BUJDÁK,J. – GÁPLOVSKÝ,A. The aggregation of thionine and methylene blue dye in smectite dispersion. In *Colloids and Surfaces A*. Vol.243, no.1-3 (2004), p.89-96
Citácie z WOS: 1
218. Gournis D; Jankovic L; Maccallini E; Benne D; Rudolf P; Colomer JF; Sooambar C; Georgakilas V; Prato M; Fanti M; Zerbetto F; Sarova GH; Guldi DM
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 128 (18) 6154-6163, 2006
- CZÍMEROVÁ,A. – JANKOVIČ,I. – BUJDÁK,J. Effect of the exchangeable cations on the spectral properties of methylene blue in clay dispersions. In *Journal of Colloid and Interface Science*. Vol.274, no.1 (2004), p.126-132
Citácie z WOS: 1
219. da Fonseca MG; Cardoso CM; Wanderley AF; Arakaki LNH; Airolti C
JOURNAL OF PHYSICS AND CHEMISTRY OF SOLIDS 67 (8) 1835-1840, 2006
- CZÍMEROVÁ,A. – BUJDÁK,J. – DOHRMANN,R. Traditional and novel methods for estimating the layer charge of smectites. In *Applied Clay Science*. Vol.34, no.1-4 (2006), p.2-13
Citácie z WOS: 1
220. Kaufhold S
APPLIED CLAY SCIENCE 34 (1-4) 14-21, 2006
- ČÍČEL,B. – KOMADEL,P. – HRONSKÝ,J. Dissolution of the fine fraction of Jelšový Potok bentonite in hydrochloric and sulphuric acids. In *Ceramics-Silikáty*. Vol.34, no.1 (1990), p.41-48
Iné citácie: 1
221. Stucki JW
PROPERTIES AND BEHAVIOR OF IRON IN CLAY MINERALS-HANDBOOK OF CLAY SCIENCE, 2006
- DEMUTH,T. – HAFNER,J. – BENCO,I. – TOULHOAT,H. Structural and acidic properties of mordenite. An ab initio density-functional study. In *Journal of Physical Chemistry B*. Vol. 104, no.19 (2000), p.4593-4607
Citácie z WOS: 6
222. Fujita H; Kanougi T; Atoguchi T
APPLIED CATALYSIS A 313 (2) 160-166, 2006
 223. Aboukais A; Zhilinskaya EA; Filimonov IN; Nesterenko NS; Timoshin SE; Ivanova II
CATALYSIS LETTERS 111 (1-2) 97-102, 2006
 224. Jardillier N; Berthomieu D; Goursot A; Reveles JU; Koster AM
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B 110 (37) 18440-18446, 2006
 225. Giuntini JC; Douillard JM; Maurin G; Devautour-Vinot S; Nicolas A; Henn F
CHEMICAL PHYSICS LETTERS 423 (1-3): 71-75 MAY 20 2006
 226. Elanany M; Vercauteren DP; Koyama M; Kubo M; Selvam P; Broclawik E; Miyamoto A
JOURNAL OF MOLECULAR CATALYSIS A 243 (1) 1-7, 2006

227. Shetty S; Pal S; Kanhere DG; Goursot A
CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL 12 (2) 518-523, 2006
- DEMUTH,T. – BENCO,I. – HAFNER,J. – TOULHOAT,H. Adsorption of water in mordenite - An ab initio study. In *International Journal of Quantum Chemistry*. Vol.84, no.1 (2001), p.110-116
Citácie z WOS: 3
228. Giuntini JC; Douillard JM; Maurin G; Devautour-Vinot S; Nicolas A; Henn F
CHEMICAL PHYSICS LETTERS 423 (1-3) 71-75, 2006
 229. Sun PP; Deore S; Navrotsky A
MICROPOROUS AND MESOPOROUS MATERIALS 91 (1-3) 15-22, 2006
 230. Elanany M; Vercauteren DP; Koyama M; Kubo M; Selvam P; Broclawik E; Miyamoto A
JOURNAL OF MOLECULAR CATALYSIS A 243 (1) 1-7, 2006
- DEMUTH,T. – BENCO,I. – HAFNER,J. – TOULHOAT,H. – HUTSCHKA,F. Ab initio investigation of the adsorption of benzene in mordenite. In *Journal of Chemical Physics*. Vol. 114, no.8 (2001), p.3703-3712
Citácie z WOS: 1
231. Jentys A; Mukti RR; Tanaka H; Lercher JA
MICROPOROUS AND MESOPOROUS MATERIALS 90 (1-3) 284-292, 2006
- DEMUTH,T. – ROZANSKA,X. – BENCO,I. – HAFNER,J. – VAN SANTEN,RA. – TOULHOAT,H. Catalytic isomerization of 2-pentene in H-ZSM-22 - A DFT investigation. In *Journal of Catalysis*. Vol.214, no.1 (2003), p.68-77
Citácie z WOS: 4
232. Li QB; East ALL
CANADIAN JOURNAL OF CHEMISTRY 84 (9) 1159-1166, 2006
 233. Cowley M
ENERGY AND FUELS 20 (5) 1771-1776, 2006
 234. Jiang YJ; Hunger M; Wang W
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 128 (35) 11679-11692, 2006
 235. Sandelin F; Salmi T; Murzin DY
CHEMICAL ENGINEERING SCIENCE 61 (4) 1157-1166, 2006
- DRÁBIK,M. – GÁLIKOVÁ,I. – HANIC,F. – SHARP,JH. MDF-related compositions based on novel low-energy clinkers. In *Chemical Papers-Chemické zvesti*. Vol.51, no.6A (1997), p. 363-366
Citácie z WOS: 2
236. Mojumdar SC; Raki L
JOURNAL OF THERMAL ANALYSIS AND CALORIMETRY 86 (3) 651-657, 2006
 237. Mojumdar SC; Raki L
JOURNAL OF THERMAL ANALYSIS AND CALORIMETRY 85 (1) 99-105, 2006
- DRÁBIK,M. – GÁLIKOVÁ,I. – ZIMMERMAN,P. Moisture attack on the advanced cement-based MDF materials. A thermoanalytical study. In *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*. Vol.56, no.1 (1999), p.117-124
Citácie z WOS: 3
238. Mojumdar SC; Raki L
JOURNAL OF THERMAL ANALYSIS AND CALORIMETRY 86 (3) 651-657, 2006
 239. Silva DA; Monteiro PJM
CEMENT AND CONCRETE RESEARCH 36 (8) 1501-1507, 2006
 240. Mojumdar SC Raki L
JOURNAL OF THERMAL ANALYSIS AND CALORIMETRY 85 (1) 99-105, 2006
- DRÁBIK,M. – MOJUMDAR,SC. – GÁLIKOVÁ,I. Changes of thermal events of macrodefect-free (MDF) cements due to the deterioration in the moist atmosphere. In *Cement and Concrete Research*. Vol.31, no.5 (2001), p.743-747
Citácie z WOS: 1
241. Silva DA; Monteiro PJM
CEMENT AND CONCRETE RESEARCH 36 (8) 1501-1507, 2006
- DRÁBIK,M. – GÁLIKOVÁ,I. Methods of thermal analysis in the detection of thaumasite and its presence in the sulfate-attacked concrete. In *Solid State Phenomena*. Vol.90-91 (2003), p.33-38
Citácie z WOS: 1
242. Martucci A; Cruciani G
PHYSICS AND CHEMISTRY OF MINERALS 33 (10) 723-731, 2006
- DRÁBIK,M. – SLADE,RCT. Macrodefect-free materials: Modification of interfaces in cement composites by polymer grafting. In *Interface Science*. Vol.12, no.4 (2004), p.375-379 Citácie z WOS: 5
243. Madhurambal G; Ramasamy P; Srinivasan PA; Mojumdar SC
JOURNAL OF THERMAL ANALYSIS AND CALORIMETRY 86 (3) 601-604, 2006

244. Mojumdar SC; Raki L
JOURNAL OF THERMAL ANALYSIS AND CALORIMETRY 86 (3) 651-657, 2006
 245. Mojumdar SC; Raki L
JOURNAL OF THERMAL ANALYSIS AND CALORIMETRY 85 (1) 99-105, 2006
 246. Segni R; Vieille L; Leroux F; Taviot-Gueho C
JOURNAL OF PHYSICS AND CHEMISTRY OF SOLIDS 67 (5-6) 1037-1042, 2006
 247. Taviot-Gueho C; Leroux F
LAYERED DOUBLE HYDROXIDES STRUCTURE AND BONDING 119 121-159, 2006
- Iné citácie: 1
248. Macphee DE
PROCEEDINGS OF ECI: ADVANCES IN CEMENT AND CONCRETE 2-7, 2006
- DRÁBIK, M. – GÁLIKOVÁ, Ľ. – VARSHNEY, K.G. – QURAIISHI, M.A. MDF cements - Synergy of the humidity and temperature effects. In *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*. Vol.76, no.1 (2004), p.91-96
- Citácie z WOS: 3
249. Madhurambal G; Ramasamy P; Srinivasan PA; Mojumdar SC
JOURNAL OF THERMAL ANALYSIS AND CALORIMETRY 86 (3) 601-604, 2006
 250. Mojumdar SC; Raki L
JOURNAL OF THERMAL ANALYSIS AND CALORIMETRY 86 (3) 651-657, 2006
 251. Mojumdar SC; Raki L
JOURNAL OF THERMAL ANALYSIS AND CALORIMETRY 85 (1) 99-105, 2006
- DUDESEK, P. – BENCO, Ľ. Cation-aided joining of surfaces of β -Si₃N₄. Structural and electronic aspects. In *Journal of the American Ceramic Society*. Vol.81, no.5 (1998), p.1248-1254
- Citácie z WOS: 1
252. Ziegler A; Idrobo JC; Cinibulk MK; Kisielowski C; Browning ND; Ritchie RO
APPLIED PHYSICS LETTERS 88 (4) Art. No. 041919, 2006
- DUDESEK, P. – BENCO, Ľ. – DAUL, C. – SCHWARZ, K. d-to-s bonding in GaN. In *Journal of Physics: Condensed Matter*. Vol.10, no.32 (1998), p.7155-7162
- Citácie z WOS: 1
253. Plucinski L; Colakerol L; Bernardis S; Zhang YF; Wang SC; O'Donnell C; Smith KE; Friel I; Moustakas TD
SURFACE SCIENCE 600 (1) 116-123, 2006
- DUSZA, J. – ŠAJGALÍK, P. – BASTL, Z. – KAVEČANSKÝ, V. – DURIŠIN, J. Properties of β -silicon nitride whiskers. In *Journal of Materials Science Letters*. Vol.9 (1992), p.208-211
- Citácie z WOS: 1
254. Yuan YB; Liu YZ; Deng KM; Yang JL
ACTA PHYSICA SINICA 55 (9) 4496-4500, 2006
- DUSZA, J. – ŠAJGALÍK, P. – STEEN, M. Fracture toughness of a silicon nitride/silicon carbide nanocomposite at 1350 °C. In *Journal of the American Society*. Vol.82, no.12 (1999), p.3613-3615
- Citácie z WOS: 1
255. Kusunose T
JOURNAL OF THE CERAMIC SOCIETY OF JAPAN 114 (1326) 167-173, 2006
- DUSZA, J. – ŠAJGALÍK, P. – STEEN, M. – SEMERAD, E. Dynamic Fatigue of a Si₃N₄ + SiC Nanocomposite at 1350 °C. In *Materials Science and Engineering A*. Vol.291 (2000)p.250-55.
- Citácie zo SCO: 1
256. Wu R; Chen J; Yang G; Pan Y; Li J; Huang Z;
ACTA MATERIAE COMPOSITAE SINICA 23 (5) 101-106, 2006
- DUSZA, J. – KOVALČÍK, J. – HVIŽDOŠ, P. – ŠAJGALÍK, P. – HNATKO, M. – REECE, M. Creep behavior of a carbon-derived Si₃N₄-SiC nanocomposite. In *Journal of the European Ceramic Society*. Vol.24, no.12 (2004), p.3307-3315
- Citácie z WOS: 2
257. Terzic A; Pavlovic L; Milutinovic-Nikolic A
SCIENCE OF SINTERING 38 (3) 255-263, 2006
 258. Wang Y; Wo YH; Yao KH; Zhu HL; Wang NY
JOURNAL OF INORGANIC MATERIALS 21 (1) 41-45, 2006
- ERIKSSON, L.A. – MALKIN, V.G. – MALKINA, O.L. – SALAHUB, D.R. Density functional calculations of isotropic hyperfine coupling constants of radical cations. In *Journal of Chemical Physics*. Vol.99, no.12 (1993), p.9756-9763
- Citácie z WOS: 3
259. Roth HD; Herbertz T; Sauers RR; Weng HX
TETRAHEDRON 62 (27) 6471-6489, 2006

260. Jalkanen KJ; Jurgensen VW; Claussen A; Rahim A; Jensen GM; Wade RC; Nardi F; Jung C; Degtyarenko IM; Nieminen RM; Herrmann F; Knapp-Mohammady M; Niehaus TA; Frimand K; Suhai S
INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY 106 (5) 1160-1198, 2006
 261. Feldman VI; Sukhov FF; Orlov AY; Tyulpina IV; Ivanchenko VK
RADIATION PHYSICS AND CHEMISTRY 75 (1) 106-114, 2006
- ERIKSSON,LA. – MALKIN,VG. – MALKINA,OL. – SALAHUB,DR. The effects of nonlocal gradient corrections in density functional calculations of hydrocarbon radical hyperfine. In *International Journal of Quantum Chemistry*. Vol.52, no.4 (1994), p.879-901
Citácie z WOS: 1
262. Roth HD; Herbertz T; Sauers RR; Weng HX
TETRAHEDRON 62 (27) 6471-6489, 2006
- ERIKSSON,LA. – MALKINA,OL. – MALKIN,VG. – SALAHUB,DR. The hyperfine structures of small radicals from density functional calculations. In *Journal of Chemical Physics*. Vol.100, no.7 (1994), p.5066-5075
Citácie z WOS: 5
263. Danilczuk M; Pogocki D; Lund A; Michalik J
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B 110 (48) 24492-24497, 2006
 264. Enders M
MACROMOLECULAR SYMPOSIA 236 38-47, 2006
 265. Sojka Z; Pietrzyk P
SPECTROCHIMICA ACTA A 63 (4) 788-794, 2006
 266. Duarte JP; Vilao RC; Alberto HV; Gil JM; Gil FPSC; Weidinger A; de Campos NA; Fostiropoulos K
PHYSICAL REVIEW B 73 (7) Art. No. 075209, 2006
 267. Jalkanen KJ; Jurgensen VW; Claussen A; Rahim A; Jensen GM; Wade RC; Nardi F; Jung C; Degtyarenko IM; Nieminen RM; Herrmann F; Knapp-Mohammady M; Niehaus TA; Frimand K; Suhai S
INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY 106 (5) 1160-1198, 2006
- ERIKSSON,LA. – MALKINA,OL. – MALKIN,VG. – SALAHUB,DR. Investigation of Mossbauer parameters for a set of iodine compounds using gradient-corrected density functional theory. In *International Journal of Quantum Chemistry*. Vol.63, no.2 (1997), p.575-583
Citácie z WOS: 1
268. Pavanello M; Mennucci B; Tomasi J
THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS 116 (4-5) 711-717, 2006
- FAURE,A. – VALIRON,P. – WERNLI,M. – WIESENFELD,L. – RIST,C. – NOGA,J. – TENNYSON,J. A full nine-dimensional potential-energy surface for hydrogen molecule-water collisions. In *Journal of Chemical Physics*. Vol.122, no.22 (2005), p.221102-1-221102-4
Citácie z WOS: 2
269. Dashevskaya EI; Litvin I; Nikitin EE; Troe J
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (15) Art. No. 154315, 2006
 270. Klopper W; Manby FR; Ten-No S; Valeev EF
INTERNATIONAL REVIEWS IN PHYSICAL CHEMISTRY 25 (3) 427-468, 2006
- FELLNER,P. – HÍVEŠ,J. – KORENKO,M. – THONSTAD,J. Cathodic overvoltage and the contents of sodium and lithium in molten aluminium during electrolysis of cryolite-based melts. In *Electrochimica Acta*. Vol.46, no.15 (2001), p.2379-2384
Citácie zo Scholar: 1
271. Dali C; Zhuxian Q; Jikun W; Zhongning S; Hongmin K; Yungang B; Zhaowen W
MATERIALS REVIEW 20 (8) 90-93, 2006
- FELLNER,P. – KORENKO,M. – DANIELIK,V. Comments on the solubility and activity of sodium in molten aluminium. In *International Jomar Thonstad Symposium*. (2002), p.199-206
Citácie zo Scholar: 1
272. Zhang SJ; Han QY; Liu ZK
JOURNAL OF ALLOYS AND COMPOUNDS 419 (1-2) 91-97, 2006
- FELLNER,P. – KORENKO,M. – DANIELIK,V. – THONSTAD,J. The content of sodium in aluminium during electrolysis of the molten systems Na₃AlF₆-NaCl-Al₂O₃ and NaF-NaCl. In *Electrochimica Acta*. Vol.49, no.9-10 (2004), p.1505-1511
Citácie z WOS: 1
273. Zhang SJ; Han QY; Liu ZK
JOURNAL OF ALLOYS AND COMPOUNDS 419 (1-2) 91-97, 2006
- FRANKE,R. – MÜLLER,H. – NOGA,J. Static electrical response properties of F⁻, Ne and HF using explicitly correlated R12 coupled cluster approach. In *Journal of Chemical Physics*. Vol.114, no.18 (2001), p.7746-7752
Citácie z WOS: 2
274. Pitonak M; Holka F; Neogrady P; Urban M
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM 768 (1-3) 79-89, 2006

275. Kloppe W; Manby FR; Ten-No S; Valeev EF
INTERNATIONAL REVIEWS IN PHYSICAL CHEMISTRY 25 (3) 427-468, 2006
- GALUSEK,D. – MAJLING,J. Preparation of Al₂O₃-ZrO₂ ceramics by infiltration processing. In *Ceramics International*. Vol.21, no.2 (1995), p.101-107
Citácie z WOS: 1
275. Oberbach T; Ortmann C; Begand S; Glien W
KEY ENGINEERING MATERIALS 309-311 1247-1250, 2006
- GALUSEK,D. – MAJLING,J. Zirconia based organic precursor infiltration as a method for preparation of ZTA ceramics .II. Sintering and materials behaviour. In *Ceramics-Silikáty*. Vol.40, no.1 (1996), p.23-35 1996
Citácie z WOS: 1
276. Oberbach T; Ortmann C; Begand S; Glien W
KEY ENGINEERING MATERIALS 309-311 1247-1250, 2006
- GALUSEK,D. – RESCHKE,S. – RIEDEL,R. – DRESSLER,W. – ŠAJGALÍK,P. – LENČEŠ, Z. – MAJLING,J. In-situ carbon content adjustment in polysilazane derived amorphous SiCN bulk ceramics. In *Journal of the European Ceramic Society*. Vol.19, no.10 (1999), p.1911-1921
Citácie z WOS: 1
277. Janakiraman N; Hoche T; Grins J; Esmaeilzadeh S
JOURNAL OF MATERIALS CHEMISTRY 16 (39) 3844-3853, 2006
- GALUSEK,D. – RILEY,FL. – RIEDEL,R. Nanoindentation of a polymer-derived amorphous silicon carbonitride ceramic. In *Journal of the American Ceramic Society*. Vol.84, no.5 (2001), p.1164-1166
Citácie z WOS: 4
278. Jang BK
JOURNAL OF ALLOYS AND COMPOUNDS 426 (1-2) 312-315, 2006
 279. Jian SR; Fang TH; Chuu DS; Ji LW
APPLIED SURFACE SCIENCE 253 (2) 833-840, 2006
 280. Cross T; Raj R
JOURNAL OF THE AMERICAN CERAMIC SOCIETY 89 (12) 3706-3714, 2006
 281. Ye YJ; Zhang LT; Cheng LF; Xu YD
JOURNAL OF INORGANIC MATERIALS 21 (4) 843-847, 2006
- GATES,WP. – KOMADEL,P. – MADEJOVÁ,J. – BUJDÁK,J. – STUCKI,JW. – KIRKPATRICK,RJ. Electronic and structural properties of reduced-charge montmorillonites. In *Applied Clay Science*. Vol.16, no.5-6 (2000), p.257-271
Citácie z WOS: 1
282. Yung KC; Wang J; Yue TM
ADVANCED COMPOSITE MATERIALS 15 (4) 371-384, 2006
- GERZABEK,MH. – AQUINO,AJA. – HABERHAUER,G. – TUNEGA,D. – LISCHKA,H. Molecular modelling - opportunities for soil research. In *Bodenkultur*. Vol.52, no.2 (2001), p. 133-146
Citácie z WOS: 1
283. Schaumann GE
JOURNAL OF PLANT NUTRITION AND SOIL SCIENCE 169 (2) 145-156, 2006
- GOURDON,O. – PETRÍČEK,V. – DUŠEK,M. – BEZDIČKA,P. – ĐUROVIČ,S. – GYEPESOVÁ,D. – EVAIN,M. Determination of the modulated structure of Sr_{14/11}CoO₃ through a (3+1)-dimensional space description and using non-harmonic ADPs. In *Acta Crystallographica B*. Vol.55 (1999), p.841-848
Citácie z WOS: 5
284. Bazuev GV
USPEKHI KHIMII 75 (9) 835-850, 2006
 285. Le Toquin R; Paulus W; Cousson A; Prestipino C; Lamberti C
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 128 (40) 13161-13174, 2006
 286. Sun JL; Li GB; Li ZF; You LP; Lin JH
INORGANIC CHEMISTRY 45 (20) 8394-8402, 2006
 287. Iwasaki K; Ito T; Matsui T; Nagasaki T; Ohta S; Koumoto K
MATERIALS RESEARCH BULLETIN 41 (4) 732-739, 2006
 288. Schonleber A; Zuniga FJ; Perez-Mato JM; Darriet J; zur Loye HC
ACTA CRYSTALLOGRAPHICA B 62 197-204, 2006
- GRANDJEAN,J. – BUJDÁK,J. – KOMADEL,P. NMR study of surfactant molecules intercalated in montmorillonite and in silylated montmorillonite. In *Clay Minerals*. Vol.38 no.3 (2003), p.367-373
Citácie z WOS: 1
289. Xue SQ; Reinholdt M; Pinnavaia TJ
POLYMER 47 (10) 3344-3350, 2006

GROßMANN,G. – POTRZEBOWSKI,MJ. – FLEISCHER,U. – KRUGER,K. – MALKINA,OL. – CIESIELSKI,W. Anisotropy of chemical shift and J coupling for ^{31}P and ^{77}Se in trimethyl and triphenyl phosphine selenides. In *Solid State Nuclear Magnetic Resonance*. Vol.13, no.1-2 (1998), p.71-85

Citácie z WOS: 1

290. Demko BA; Eichele K; Wasylishen RE
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (50) 13537-13550, 2006

GROßMANN,G. – SCHELLER,D. – MALKINA,OL. – MALKIN,VG. – ZAHN,G. – SCHMITT,H. – HAEBERLEN,U. Experimental and theoretical ^{31}P and ^{77}Se nuclear magnetic shielding tensors for bis(dineopentoxyposphorothioyl) diselenide. In *Solid State Nuclear Magnetic Resonance*. Vol.17, no.1-4 (2000), p.22-38

Citácie z WOS: 1

291. Ackermann M; Pascariu A; Hoher T; Siehl HU; Berger S
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 128 (26) 8434-8440, 2006

GROßMANN,G. – OHMS,G. – KRÜGER,K. – KARAGHIOSSOFF,K. – ECKSTEIN,K. – HAHN,J. – HOPP,A. – MALKINA,OL. – HROBÁRIK,P. Diselenadiphosphatdiselenide und triselenadiphosphatdiselenide - Synthese und charakterisierung mittels ^{31}P und ^{77}Se - festkörper-NMR spektroskopie. In *Zeitschrift für Anorganische und Allgemeine Chemie*. Vol. 627, no.6 (2001), p.1269-1278

Citácie z WOS: 3

292. Mundt O; Becker G; Baumgarten J; Riffel H; Simon A
ZEITSCHRIFT FÜR ANORGANISCHE UND ALLGEMEINE CHEMIE 632 (10-11) 1687-1709, 2006
293. Shi WF; Shafaei-Fallah M; Anson CE; Rothenberger A
DALTON TRANSACTIONS (24) 2979-2983, 2006
294. Parveen S; Kilian P; Slawin AMZ; Woollins JD
DALTON TRANSACTIONS (21) 2586-2590, 2006

HABERHAUER,G. – PFEIFFER,L. – GERZABEK,MH. – KIRCHMANN,H. – AQUINO, AJA. – TUNEGA,D. – LISCHKA,H. Response of sorption processes of MCPA to the amount and origin of organic matter in a long-term field experiment. In *European Journal of Soil Science*. Vol.52, no.2 (2001), p.279-286

Citácie z WOS: 1

295. Kah M; Brown CD
REVIEWS OF ENVIRONMENTAL CONTAMINATION AND TOXICOLOGY 188149-217, 2006

HARTMANOVÁ,M.- THURZO,I. – JERGEL,M. – BARTOŠ,J. – KADLEC,F. – ŽELEZNÝ, V. – TUNEGA,D. – KUNDRAČÍK,F. – CHROMÍK,S. – BRUNEL,M. Characterization of yttria-stabilized zirconia thin films deposited by electron beam evaporation on silicon substrates. In *Journal of Materials Science*. Vol.33, no.4 (1998), p.969-975

Citácie z WOS: 1

296. Ghosh A; Suri AK; Pandey M; Thomas S; Mohan TRR; Rao BT
MATERIALS LETTERS 60 (9-10) 1170-1173, 2006

HAFNER,J. – BENCO,L. – BUČKO,T. Acid-based catalysis in zeolites investigated by density-functional methods. In *Topics in Catalysis*. Vol.37, no.1 (2006), p.41-54

Citácie z WOS: 2

297. Tuma C; Sauer J
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 8 (34) 3955-3965, 2006
298. Hammer B
TOPICS IN CATALYSIS 37 (1) 3-16, 2006

HAVIAR,M.- LENČEŠ,Z. – HERBERTSSON,H. The stability of yttrium α -SiAlON and β -SiAlON at high pressure and high temperature. In *Journal of Materials Science Letters*. Vol. 16, no.3 (1997), p.236-238

Citácie z WOS: 1

299. Juarez-Arellano EA; Friedrich A; Knorr K; Lieb A; Winkler B; Amboage M; Hanfland M; Schnick W
ACTA CRYSTALLOGRAPHICA B 62 424-430, 2006

HELGAKER,T. – KLOPPER,W. – KOCH,H. – NOGA,J. Basis-set convergence of correlated calculations on water. In *Journal of Chemical Physics*. Vol.106, no.23 (1997), p.9639-9646

Citácie z WOS: 55

300. Shin I; Park M; Min SK; Lee EC; Suh SB; Kim KS
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (23) Art. No. 234305, 2006
301. Kwac K; Lee C; Jung Y; Han J; Kwak K; Zheng JR; Fayer MD; Cho M
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (24) Art. No. 244508, 2006
302. Peterson KA; Shepler BC; Figgen D; Stoll H
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (51) 13877-13883, 2006
303. Steele RP; Shao YH; DiStasio RA; Head-Gordon M
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (51) 13915-13922, 2006
304. Barletta P; Shirin SV; Zobov NF; Polyansky OL; Tennyson J; Valeev EF; Csaszar AG
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (20) Art. No. 204307, 2006

305. Lau KC; Ng CY
ACCOUNTS OF CHEMICAL RESEARCH 39 (11) 823-829, 2006
306. Shepler BC; Peterson KA
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (44) 12321-12329, 2006
307. Gutowski KE; Dixon DA
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (43) 12044-12054, 2006
308. Pickard FC; Griffith DR; Ferrara SJ; Liptak MD; Kirschner KN; Shields GC
INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY 106 (15) 3122-3128, 2006
309. Goll E; Werner HJ; Stoll H; Leininger T; Gori-Giorgi P; Savin A
CHEMICAL PHYSICS 329 (1-3): 276-282, 2006
310. Gutowski KE; Rogers RD; Dixon DA
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (42) 11890-11897, 2006
311. Varandas AJC; Piecuch P
CHEMICAL PHYSICS LETTERS 430 (4-6) 448-453, 2006
312. Gauss J; Tajti A; Kallay M; Stanton JF; Szalay PG
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (14) Art. No. 144111, 2006
313. Tsuzuki S; Honda K; Uchimaru T; Mikami M
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (12) Art. No. 124304, 2006
314. Barbieri PL; Fantin PA; Jorge FE
MOLECULAR PHYSICS 104 (18) 2945-2954, 2006
315. DeYonker NJ; Grimes T; Yockel S; Dinescu A; Mintz B; Cundari TR; Wilson AK
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (10) Art. No. 104111, 2006
316. Morita S; Fujii A; Mikami N; Tsuzuki S
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (36) 10583-10590, 2006
317. Li AHT; Chao SD
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (9) Art. No. 094312, 2006
318. Peterson KA; Lyons JR; Francisco JS
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (8) Art. No. 084314, 2006
319. Tuma C; Sauer J
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 8 (34) 3955-3965, 2006
320. Wang H; Li JC; Song XL; Li YZ; Hou H; Wang BS; Su HM; Kong FN
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (34) 10336-10344, 2006
321. Matus MH; Arduengo AJ; Dixon DA
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (33) 10116-10121, 2006
322. Marenich AV; Boggs JE
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE 780-81 163-170, 2006
323. Puzzarini C
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE 780-81 238-246, 2006
324. Bomble YJ; Vazquez J; Kallay M; Michauk C; Szalay PG; Csaszar AG; Gauss J; Stanton JF
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (6) Art. No. 064108, 2006
325. Steele RP; DiStasio RA; Shao Y; Kong J; Head-Gordon M
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (7) Art. No. 074108, 2006
326. Balabanov NB; Peterson KA
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (7) Art. No. 074110, 2006
327. Kamiya M; Hirata S
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (7) Art. No. 074111, 2006
328. Puzzarini C; Cazzoli G; Gambi A; Gauss J
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (5) Art. No. 054307, 2006
329. Ho DS; DeYonker NJ; Wilson AK; Cundari TR
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (31) 9767-9770, 2006
330. Svozil D; Jungwirth P
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (29) 9194-9199, 2006
331. Matus MH; Nguyen MT; Dixon DA
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (28) 8864-8871, 2006
332. Ji YY; Bobadova-Parvanova P; Larson C; Samartzis PC; Morokuma K; Lin JJM; Ching TT; Chaudhuri C; Lee SH; Wodtke AM
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (24) Art. No. 241106, 2006
333. Jung Y; Head-Gordon M
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 8 (24) 2831-2840, 2006
334. Lau KC; Woo HK; Wang P; Xing X; Ng CY
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (22) Art. No. 224311, 2006
335. Polly R; Werner HJ; Dahle P; Taylor PR
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (23) Art. No. 234107, 2006
336. Voloshina E; Paulus B
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (23) Art. No. 234711, 2006
337. Kurten T; Sundberg MR; Vehkamäki H; Noppel M; Blomqvist J; Kulmala M
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (22) 7178-7188, 2006

338. Bytautas L; Ruedenberg K
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (17) Art. No. 174304, 2006
339. van Mourik T
THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS 115 (4) 274-275, 2006
340. Shibasaki K; Fujii A; Mikami N; Tsuzuki S
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (13); 4397-4404, 2006
341. Tsuzuki S; Honda K; Uchimaru T; Mikami M
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (11) Art. No. 114304, 2006
342. Lau KC; Ng CY
CHINESE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 19 (1) 29-38, 2006
343. Wright TG; Viehland LA
CHEMICAL PHYSICS LETTERS 420 (1-3) 24-28, 2006
344. Frigato T; Svozil D; Jungwirth P
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (9) 2916-2923, 2006
345. Flores JR; Slupski R; Jankowski K
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (10) Art. No. 104107, 2006
346. Manninen P; Vaara J
JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY 27 (4) 434-445, 2006
347. Hwang R; Park YC; Lee JS
THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS 115 (1) 54-58, 2006
348. Breidung J; Thiel W
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (4) 1575-1585, 2006
349. Tsuzuki S; Uchimaru T; Mikami M
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (5) 2027-2033, 2006
350. Werner HJ; Manby FR
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (5) Art. No. 054114, 2006
351. Valeev EF
CHEMICAL PHYSICS LETTERS 418 (4-6) 333-336, 2006
352. Wheeler SE; Yamaguchi Y; Schaefer HF
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (4) Art. No. 044322, 2006
353. Lau KC; Ng CY
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (4) Art. No. 044323, 2006
354. Dixon DA; Francisco JS; Alexeev Y
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (1) 185-191, 2006

HROBÁRIKOVÁ,J. – MADEJOVÁ,J. – KOMADEL,P. Effect of heating temperature on Li-fixation, layer charge and properties of fine fractions of bentonites. In *Journal of Materials Chemistry*. Vol.11, no.5 (2001), p.1452-1457
Citácie z WOS: 2

355. Zemanova A; Link G; Takayama S; Nuesch R; Janek M
APPLIED CLAY SCIENCE 32 (3-4) 271-282, 2006
356. Campbell S; Liang MI
HIGH PERFORMANCE POLYMERS 18 (1) 71-82, 2006

HROBÁRIKOVÁ,J. – KOMADEL,P. Sorption properties of reduced-charge montmorillonites. In *Geologica Carpathica*. Vol.53, no.2 (2002), p.93-98
Iné citácie: 1

357. Heller-Kallai L.
THERMALLY MODIFIED CLAY MINERALS-HANDBOOK OF CLAY SCIENCE, 2006

HVIZDOŠ,P. – KAŠIAROVÁ,M. – DUSZA,J. – HNATKO,M. – ŠAJGALÍK,P. Mechanical properties of Si₃N₄/SiC nanocomposites measured by instrumented indentation with sphere. In *Kovové Materiály-Metallic Materials*. Vol.42 no.1 (2004), p.51-62
Citácie z WOS: 1

358. Gondar E; Gabrisova Z; Rosko M; Zemankova M
KOVOVE MATERIALY-METALLIC MATERIALS 44 (2) 113-118, 2006

JAMNICKÝ,M. – ZNÁŠIK,P. – TUNEGA,D. – INGRAM,MD. Class formation and structure in the system Cu₂O–P₂O₅–MoO₃. In *Journal of Non-crystalline Solids*. Vol.185, no.1-2 (1995), p.151-158
Citácie z WOS: 1

359. Kumar VR; Rao JL; Gopal NO
JOURNAL OF MATERIALS SCIENCE 41 (7) 2045-2053, 2006

JANEK,M. – KOMADEL,P. – LAGALY,G. Effect of autotransformation on the layer charge of smectites determined by the alkylammonium method. In *Clay Minerals*. Vol.32, no.4 (1997), p.623-632
Citácie z WOS: 3

360. Czimerova A; Bujdak J; Dohrmann R
APPLIED CLAY SCIENCE 34 (1-4) 2-13, 2006

361. Petit S; Righl D; Madejova J
APPLIED CLAY SCIENCE 34 (1-4) 22-30, 2006
 362. Bujdak J
APPLIED CLAY SCIENCE 34 (1-4) 58-73, 2006
- JANEK,M. – KOMADEL,P. Acidity of proton saturated and autotransformed smectites characterized with proton affinity distribution. In *Geologica Carpathica*. Vol.50, no.5 (1999), p.373-378
Citácie z WOS: 1
363. Lombardi BM; Sanchez RMT; Eloy P; Genet M
APPLIED CLAY SCIENCE 33 (1) 59-65, 2006
- Iné citácie: 1
364. Gates WP
X-ray ABSORPTION SPECTROSCOPY-HANDBOOK OF CLAY SCIENCE, 2006
- JANEK,M. – SMRČOK,L. Application of an internal standard technique by transmission X-ray diffraction to assess layer charge of a montmorillonite by using the alkylammonium method. In *Clays and Clay Minerals*. Vol.47, no.2 (1999), p.113-118
Citácie z WOS: 1
365. Tambach TJ; Boek ES; Smit B
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 8 (23) 2700-2702, 2006
- JANKOVIČ,L. – KOMADEL,P. Catalytic properties of a heated ammonium-saturated dioctahedral smectite. In *Collection of Czechoslovak Chemical Communications*. Vol.65, no.9 (2000), p.1527-1536
Iné citácie: 1
366. Adams JM; McCabe RW
CLAY MINERALS AS CATALYSTS HANDBOOK OF CLAY SCIENCE, 2006
- JANKOVIČ,L. – KOMADEL,P. Metal cation-exchanged montmorillonite catalyzed protection of aromatic aldehydes with Ac_2O . In *Journal of Catalysis*. Vol.218, no.1 (2003), p. 227-233
Citácie z WOS: 3
367. Yadav MK; Jasra RV
CATALYSIS COMMUNICATIONS 7 (11) 889-895, 2006
 368. Heravi MM; Taheri S; Bakhtiari K; Oskooie HA
MONATSHFTE FÜR CHEMIE 137 (8) 1075-1078, 2006
 369. Tyagi B; Chudasama CD; Jasra RV
APPLIED CLAY SCIENCE 31 (1-2) 16-28, 2006
- JASZUNSKI,M. – KLOPPER,W. – NOGA,J. Explicitly correlated coupled cluster R12 calculations of the dipole polarizability of He_2 . In *Journal of Chemical Physics*. Vol.113, no.1 (2000), p.71-72
Citácie z WOS: 1
370. Hobza P; Zahradnik R; Muller-Dethlefs K
COLLECTION OF CZECHOSLOVAK CHEMICAL COMMUNICATIONS 71 (4) 443-531, 2006
- KANEKO,Y. – IYI,N. – BUJDÁK,J. – SASAI,R. – FUJITA,T. Effect of layer charge density on orientation and aggregation of a cationic laser dye incorporated in the interlayer space of montmorillonites. In *Journal of Colloid and Interface Science*. Vol.269, no.1 (2004), p.22-25
Citácie z WOS: 2
371. Kimura T; Uemura T; Kimura T; Takagi S; Inoue H
MACROMOLECULAR SYMPOSIA 242 120-125, 2006
 372. Hu QH; Qiao SZ; Haghseresht F; Wilson MA; Lu GQ
INDUSTRIAL AND ENGINEERING CHEMISTRY RESEARCH 45 (2) 733-738, 2006
- KARAKASSIDES,MA. – MADEJOVÁ,J. – ARVAIOVÁ,B. – BOURLINOS,A. – PETRIDIS,D. – KOMADEL,P. Location of Li(I), Cu(II) and Cd(II) in heated montmorillonite: Evidence from specular reflectance infrared and electron spin resonance spectroscopies. In *Journal of Materials Chemistry*. Vol.9, no.7 (1999), p.1553-1558
Citácie z WOS: 2
373. Friedrich F; Gasharova B; Mathis YL; Nuesch R; Weidler PG
APPLIED SPECTROSCOPY 60 (7) 723-728, 2006
 374. Zemanova A; Link G; Takayama S; Nuesch R; Janek M
APPLIED CLAY SCIENCE 32 (3-4) 271-282, 2006
- KAŠIAROVÁ,M. – RUDNAYOVÁ,E. – KOVALČÍK,J. – DUSZA,J. – HNATKO,M. – ŠAJGALÍK,P. – MERSTALLINGER,A. Wear and creep characteristics of a carbon-derived $\text{Si}_3\text{N}_4/\text{SiC}$ micro/nanocomposite. In *Materialwissenschaft und Werkstofftechnik*. Vol.34, no.4 (2003), p.338-342
Citácie z WOS: 1
375. Wagner NJ; Gerberich WW; Heberlein JVR
SURFACE AND COATINGS TECHNOLOGY 201 (7) 4168-4173, 2006

Iné citácie: 1

376. Wagner NJ; Gerberich WW; Heberlein JVR
PROCEEDINGS OF THE 4TH INTERNATIONAL SURFACE ENGINEERING CONFERENCE 203-206,
2006

KAŠIAROVÁ, M. – RUDNAYOVÁ, E. – DUSZA, J. – HNATKO, M. – ŠAJGALÍK, P. – MERSTALLINGER, A. – KUZSELLA, L. Some tribological properties of carbon-derived $\text{Si}_3\text{N}_4/\text{SiC}$ nanocomposite. In *Journal of the European Ceramic Society*. Vol.24, no.12 (2004), p.3431- 35.

Citácie zo SCO: 1

377. Zhang YS; Chen JM; Hu LT
MOCAXUE XUEBAO TRIBOLOGY 26 (3) 284-288, 2006

KAUPP, M. – MALKIN, V.G. – MALKINA, O.L. – SALAHUB, D.R. Calculation of ligand NMR-chemical shifts in transition-metal complexes using ab initio effective-core potentials and density functional theory. In *Chemical Physics Letters*. Vol.235, no.3-4 (1995), p.382-388

Citácie z WOS: 3

378. Buhl M; Holub J; Hnyk D; Machacek J
ORGANOMETALLICS 25 (9) 2173-2181, 2006
379. Pazderski L; Szlyk E; Sitkowski J; Kamiński B; Kozerski L; Tousek J; Marek R
MAGNETIC RESONANCE IN CHEMISTRY 44 (2): 163-170 FEB 2006
380. Corminboeuf C
CHEMICAL PHYSICS LETTERS 418 (4-6) 437-441, 2006

KAUPP, M. – MALKIN, V.G. – MALKINA, O.L. – SALAHUB, D.R. Scalar relativistic effects on ^{17}O NMR chemical shifts in transition-metal oxo complexes. An ab initio ECP/DFT study. In *Journal of the American Chemical Society*. Vol.117, no.6 (1995), p.1851-1852

Citácie z WOS: 4

381. Ramirez JZ; Vargas R; Garza J; Hay BP
JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION 2 (6) 1510-1519, 2006
382. Fujii H; Kurahashi T; Tosha T; Yoshimura T; Kitagawa T
JOURNAL OF INORGANIC BIOCHEMISTRY 100 (4) 533-541, 2006
383. Buhl M; Holub J; Hnyk D; Machacek J
ORGANOMETALLICS 25 (9) 2173-2181, 2006
384. Pazderski L; Szlyk E; Sitkowski J; Kamiński B; Kozerski L; Tousek J; Marek R
MAGNETIC RESONANCE IN CHEMISTRY 44 (2) 163-170, 2006

KAUPP, M. – MALKIN, V.G. – MALKINA, O.L. – SALAHUB, D.R. Ab initio ECP/DFT calculation and interpretation of carbon and oxygen NMR chemical shift tensors in transition-metal carbonyl complexes. In *Chemistry-A European Journal*. Vol.2, 1 (1996), p.24-30

Citácie z WOS: 1

385. Ramirez JZ; Vargas R; Garza J; Hay BP
JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION 2 (6) 1510-1519, 2006

KAUPP, M. – MALKINA, O.L. – MALKIN, V.G. Interpretation of ^{13}C NMR chemical shifts in halomethyl cations. On the importance of spin-orbit coupling and electron correlation. In *Chemical Physics Letters*. Vol.265, no.1-2 (1997), p.55-59

Citácie z WOS: 1

386. Okazaki T; Laali KK
JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY 71 (26) 9643-9650, 2006

KAUPP, M. – MALKINA, O.L. – MALKIN, V.G. The calculation of ^{17}O chemical shielding in transition metal oxo complexes .I. Comparison of DFT and ab initio approaches, and mechanisms of relativity-induced shielding. In *Journal of Chemical Physics*. Vol.106, no.22 (1997), p.9201-9212

Citácie z WOS: 2

387. Gracia J; Poblet JM; Autschbach J; Kazansky LP
EUROPEAN JOURNAL OF INORGANIC CHEMISTRY (6) 1139-1148, 2006
388. Ida R; De Clerk M; Wu G
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (3) 1065-1071, 2006

KAUPP, M. – MALKINA, O.L. – MALKIN, V.G. – PYYKKÖ, P. How do spin-orbit-induced heavy-atom effects on NMR chemical shifts work? Validation of a simple analogy to spin-spin coupling by density functional theory (DFT) calculations on some iodo compounds. In *Chemistry-A European Journal*. Vol.4, 1 (1998), p.118-126

Citácie z WOS: 9

389. Lantto P; Romero RH; Gomez SS; Aucar GA; Vaara J
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (18) Art. No. 184113, 2006
390. Hnyk D; Buhl M; Holub J; Hayes SA; Wann DA; Mackie ID; Borisenko KB; Robertson HE; Rankin DWH
INORGANIC CHEMISTRY 45 (15) 6014-6019, 2006

391. Buhl M
MAGNETIC RESONANCE IN CHEMISTRY 44 (7) 661-668, 2006
392. Buhl M; Holub J; Hnyk D; Machacek J
ORGANOMETALLICS 25 (9) 2173-2181, 2006
393. Sterzel M; Autschbach J
INORGANIC CHEMISTRY 45 (8) 3316-3324, 2006
394. Gracia J; Poblet JM; Autschbach J; Kazansky LP
EUROPEAN JOURNAL OF INORGANIC CHEMISTRY (6) 1139-1148, 2006
395. Pazderski L; Szlyk E; Sitkowski J; Kamiński B; Kozerski L; Tousek J; Marek R
MAGNETIC RESONANCE IN CHEMISTRY 44 (2) 163-170, 2006
396. Bagno A; Casella G; Saielli G
JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION 2 (1) 37-46, 2006
397. Contini A; Donatella N; Trimarco P
JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY 71 (1) 159-166, 2006

KAUPP,M. – MALKIN,V.G. Special issue - Quantum chemical calculations of NMR and EPR parameters – Foreword. In *Journal of Computational Chemistry*. Vol.20, no.12 (1999)

Citácie z WOS: 1

398. Sychrovsky V; Vokacova Z; Sponer J; Spackova N; Schneider B
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B 110 (45) 22894-22902, 2006

KAUPP,M. – AUBAUER,C. – ENGELHARDT,G. – KLAPOTKE,TM. – MALKINA,OL. The PI_4^+ cation has an extremely large negative ^{31}P nuclear magnetic resonance chemical shift, due to spin-orbit coupling: A quantum-chemical prediction and its confirmation by solid-state nuclear magnetic resonance spectroscopy. In *Journal of Chemical Physics*. Vol.110 no.8 (1999), p.3897-3902

Citácie z WOS: 5

399. Krossing I; Reisinger A
COORDINATION CHEMISTRY REVIEWS 250 (21-22) 2721-2744, 2006
400. Gonsior M; Muller L; Krossing I
CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL 12 (22) 5815-5822, 2006
401. Gonsior M; Krossing I; Matern E
CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL 12 (7) 1986-1996, 2006
402. Gonsior M; Krossing I; Matern E
CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL 12 (6) 1703-1714, 2006
403. Bagno A; Casella G; Saielli G
JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION 2 (1) 37-46, 2006

KAUPP,M. – REMENYI,C. – VAARA,J. – MALKINA,OL. – MALKIN,V.G. Density functional calculations of electronic g-tensors for semiquinone radical anions. The role of hydrogen bonding and substituent effects. In *Journal of the American Chemical Society*. Vol. 124, no.11 (2002), p.2709-2722

Citácie z WOS: 7

404. Lu JM; Rosokha SV; Neretin IS; Kochi JK
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 128 (51) 16708-16719, 2006
405. Sinnecker S; Flores M; Lubitz W
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 8 (48) 5659-5670, 2006
406. Frontana C; Vazquez-Mayagoitia A; Garza J; Vargas R; Gonzalez I
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (30) 9411-9419, 2006
407. Epel B; Niklas J; Sinnecker S; Zimmermann H; Lubitz W
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B 110 (23) 11549-11560, 2006
408. Kay CWM; Mennenga B; Gorisch H; Bittl R
PROCEEDINGS OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES 103 (14) 5267-5272, 2006
409. Sinnecker S; Rajendran A; Klamt A; Diedenhofen M; Neese F
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (6) 2235-2245, 2006
410. Wass JRTJ; Ahlberg E; Panas I; Schiffrin DJ
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (5) 2005-2020, 2006

KAUPP,M. – REVIKINE,R. – MALKINA,OL. – ARBUZNIKOV,A. – SCHIMMELPFENNIG,B. – MALKIN,V.G. Calculation of electronic g-tensors for transition metal complexes using hybrid density functionals and atomic meanfield spin-orbit operators. In *Journal of Computational Chemistry*. Vol.23, no.8 (2002), p.794-803

Citácie z WOS: 9

411. Barone V; Brustolon M; Cimino P; Polimeno A; Zerbetto M; Zoleo A
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 128 (49) 15865-15873, 2006
412. Shaw JL; Wolowska J; Collison D; Howard JAK; McInnes EJJ; McMaster J; Blake AJ; Wilson C; Schroder M
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 128 (42) 13827-13839, 2006
413. Zbiri M
INORGANICA CHIMICA ACTA 359 (12) 3865-3870, 2006

414. Neese F
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 128 (31) 10213-10222, 2006
 415. Bolvin H
CHEMPHYSICHEM 7 (7) 1575-1589, 2006
 416. Sinnecker S; Neese F
JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY 27 (12) 1463-1475, 2006
 417. Pietrucci F; Bernasconi M; Di Valentin C; Mauri F; Pickard CJ
PHYSICAL REVIEW B 73 (13) Art. No. 134112, 2006
 418. Kababya S; Nelson J; Calle C; Neese F; Goldfarb D
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 128 (6) 2017-2029, 2006
 419. Sinnecker S; Rajendran A; Klamt A; Diedenhofen M; Neese F
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (6) 2235-2245, 2006
- KAUPP,M. – GRESS,T. – REVIKINE,R. – MALKINA,OL. – MALKIN,VG. g tensor and spin density of the modified tyrosyl radical in galactose oxidase: A density functional study. In *Journal of Physical Chemistry B*. Vol.107, no.1 (2003), p.331-337
Citácie z WOS: 3
420. Pogni R; Baratto MC; Teutloff C; Giansanti S; Ruiz-Duenas FJ; Choinowski T; Piontek K; Martinez AT; Lendzian F; Basosi R
JOURNAL OF BIOLOGICAL CHEMISTRY 281 (14) 9517-9526, 2006
 421. Patra S; Sarkar B; Maji S; Fiedler J; Urbanos FA; Jimenez-Aparicio R; Kaim W; Lahiri GK
CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL 12 (2) 489-498, 2006
 422. Zueva E; Walton PH; McGrady JE
DALTON TRANSACTIONS (1) 159-167, 2006
- KAUPP,M. – PATRAKOV,A. – REVIKINE,R. – MALKINA,OL. Understanding the conformational dependence of spin-spin coupling constants: Through-bond and through-space $J(^{31}\text{P}, ^{31}\text{P})$ coupling in tetraphosphane-1,4-diides $[\text{M}(\text{L})_x]_2[\text{P}_4\text{R}_4]$. In *Chemistry-A European Journal*. Vol.11, no.9 (2005), p.2773-2782 APR 22 2005
Citácie z WOS: 5
423. Hatnean JA; Raturi R; Lefebvre J; Leznoff DB; Lawes G; Johnson SA
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 128 (46) 14992-14999, 2006
 424. Wolf R; Gomez-Ruiz S; Reinhold J; Bohlmann W; Hey-Hawkins E
INORGANIC CHEMISTRY 45 (22) 9107-9113, 2006
 425. Stein D; Dransfeld A; Flock M; Ruegger H; Grutzmacher H
EUROPEAN JOURNAL OF INORGANIC CHEMISTRY (20) 4157-4167, 2006
 426. Wolf R; Hey-Hawkins E
ZEITSCHRIFT FÜR ANORGANISCHE UND ALLGEMEINE CHEMIE 632 (5) 727-734, 2006
 427. Soncini A; Lazzeretti P
CHEMPHYSICHEM 7 (3) 679-684, 2006
- KAVECKÝ,Š. – JANEKOVÁ,B. – MADEJOVÁ,J. – ŠAJGALÍK,P. Silicon carbide powder synthesis by chemical vapour deposition from silane/acetylene reaction system. In *Journal of the European Ceramic Society*. Vol.20, no.12 (2000), p.1939-1946
Citácie z WOS: 3
428. Larpiattaworn S; Ngerchuklin P; Khongwong W; Pankurdee N; Wada S
CERAMICS INTERNATIONAL 32 (8) 899-904, 2006
 429. Vahlas C; Caussat B; Serp P; Angelopoulos GN
MATERIALS SCIENCE AND ENGINEERING 53 (1-2) 1-72, 2006
 430. Liu XK; Luo F; Zhu DM; Zhou WC
TRANSACTIONS OF NONFERROUS METALS SOCIETY OF CHINA B 16 S494-S497, 2006
- Citácie zo SCO: 1
431. Shi L; Zhao H; Yan Y; Li Z; Tang C
JOURNAL OF THE CHINESE CERAMIC SOCIETY 34 (11) 1397-1401, 2006
- KEDŽUCH,S. – MILKO,M. – NOGA,J. Alternative formulation of the matrix elements in MP2-R12 theory. In *International Journal of Quantum Chemistry*. Vol.105, no.6 (2005), p.929-936
Citácie z WOS: 1
432. Klopper W; Manby FR; Ten-No S; Valeev EF
INTERNATIONAL REVIEWS IN PHYSICAL CHEMISTRY 25 (3) 427-468, 2006
- KEDŽUCH,S. – NOGA,J. – VALIRON,P. Universal R12 suited basis sets for atoms from lithium to fluorine
MOLECULAR PHYSICS 103 (6-8): 999-1005 MAR-APR 2005
Citácie z WOS: 1
433. Klopper W; Manby FR; Ten-No S; Valeev EF
INTERNATIONAL REVIEWS IN PHYSICAL CHEMISTRY 25 (3) 427-468, 2006

KLOPPER,W. – NOGA,J. An explicitly correlated coupled –cluster calculation of the helium-helium interatomic potential. In *Journal of Chemical Physics*. Vol.103, no.14 (1995), p.6127-6132

Citácie z WOS: 2

- 434. Hobza P; Zahradnik R; Muller-Dethlefs K
COLLECTION OF CZECHOSLOVAK CHEMICAL COMMUNICATIONS 71 (4) 443-531, 2006
- 435. van Mourik T
THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS 115 (4) 274-275, 2006

KLOPPER,W. – NOGA,J. – KOCH,H. – HELGAKER,T. Multiple basis sets in calculations of triples corrections in coupled-cluster theory. In *Theoretical Chemistry Accounts*. Vol.97, no.1-4 (1997), p.164-176

Citácie z WOS: 4

- 436. Pitonak M; Holka F; Neogady P; Urban M
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM 768 (1-3) 79-89, 2006
- 437. Pitonak M; Neogady P; Kello V; Urban M
MOLECULAR PHYSICS 104 (13-14) 2277-2292, 2006
- 438. Bytautas L; Ruedenberg K
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (17) Art. No. 174304, 2006
- 439. Breidung J; Thiel W
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (4) 1575-1585, 2006

KLOPPER,W. – KUTZELNIGG,W. – MÜLLER,H. – NOGA,J. – VOGTNER,S. Extremal electron pairs. Application to electron correlation, especially the R12 method. In *Topics in Current Chemistry*. Vol.203 (1999), p.21-42

Citácie z WOS: 1

- 440. Valeev EF
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (24) Art. No. 244106, 2006

KLOPPER,W. – NOGA,J. Accurate quantum-chemical prediction of enthalpies of formation of small molecules in the gas phase. In *Chemphyschem*. Vol.4, no.1 (2003), p.32-48

Citácie z WOS: 2

- 441. Christiansen O
THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS 116 (1-3) 106-123, 2006
- 442. Denis PA
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (17) 5887-5892, 2006

KLOPPER,W. – NOGA,J. Linear R12 terms in coupled cluster theory Progress in Theoretical Chemistry and Physics. *Explicitly Correlated Wave Functions in Chemistry and Physics* 13 149-183 2003.

Citácie z WOS: 1

- 443. Benkova Z; Cernusak I; Zahradnik P
MOLECULAR PHYSICS 104 (13-14) 2011-2026, 2006

KOMADEL,P. – LEAR,PR. – STUCKI,JW. Reduction and reoxidation of nontronite: Extent of reduction and reaction-rates. In *Clays and Clay Minerals*. Vol.38, no.2 (1990), p.203-208

Citácie z WOS: 1

- 444. Hofstetter TB; Neumann A; Schwarzenbach RP
ENVIRONMENTAL SCIENCE AND TECHNOLOGY 40 (1) 235-242, 2006

KOMADEL,P. – SCHMIDT,D. – MADEJOVÁ,J. – ČÍČEL,B. Alternation of smectites by treatments with hydrochloric acid and sodium carbonate solutions. In *Applied Clay Science*. Vol.5 (1990) p.113-122 1990

Citácie z WOS: 5

- 445. Dali-Youcef Z; Bouabdasselem H; Bettahar N
COMPTES RENDUS CHIMIE 9 (10) 1295-1300, 2006
- 446. Hassan MS; Baïoumy HM
CLAYS AND CLAY MINERALS 54 (4) 491-499, 2006
- 447. Teng MY; Lin SH
DESALINATION 194 (1-3): 156-165 JUN 10 2006
- 448. Jozefaciuk G; Matyka-Sarzynska D
CLAYS AND CLAY MINERALS 54 (2) 220-229, 2006
- 449. Wu ZS; Li C; Sun XF; Xu XL; Dai B; Li JE; Zhao HS
CHINESE JOURNAL OF CHEMICAL ENGINEERING 14 (2) 253-258, 2006

KOMADEL,P. – MADEJOVÁ,J. – STUCKI,JW. Reduction and reoxidation of nontronite: Questions of reversibility. In *Clays and Clay Minerals*. Vol.43, no.1 (1995), p.105-110

Citácie z WOS: 1

- 450. Wilson J; Cressey G; Cressey B; Cuadros J; Ragnarsdottir KV; Savage D; Shibata M
GEOCHIMICA ET COSMOCHIMICA ACTA 70 (2) 323-336, 2006

Iné citácie: 1

451. Gates WP
X-ray ABSORPTION SPECTROSCOPY-HANDBOOK OF CLAY SCIENCE, 2006
- KOMADEL,P. – BUJDÁK,J. – MADEJOVÁ,J. – ŠUCHA,V. – ELSASS,F. Effect of non-swelling layers on the dissolution of reduced-charge montmorillonite in hydrochloric acid. In *Clay Minerals*. Vol.31, no.3 (1996), p.333-345
Citácie z WOS: 2
452. Vukovic Z; Milutonovic A; Rozic L; Rosic A; Nedic Z; Jovanovic D
CLAYS AND CLAY MINERALS 54 (6) 697-702, 2006
453. Okada K; Arimitsu N; Karneshima Y; Nakajima A; MacKenzie KJD
APPLIED CLAY SCIENCE 31 (3-4) 185-193, 2006
- Iné citácie: 1
454. Heller-Kallai L
THERMALLY MODIFIED CLAY MINERALS-HANDBOOK OF CLAY SCIENCE, 2006
- KOMADEL,P. – MADEJOVÁ,J. JANEK,M. – GATES,WP. – KIRKPATRICK,RJ. – STUCKI,JW. Dissolution of hectorite in inorganic acids. In *Clays and Clay Minerals*. Vol.44 no.2 (1996), p.228-236
Citácie z WOS: 3
455. Tyagi B; Chudasama CD; Jasra RV
SPECTROCHIMICA ACTA A 64 (2) 273-278, 2006
456. Valentin JL; Lopez-Manchado MA; Posadas P; Rodriguez A; Marcos-Fernandez AM; Ibarra L
JOURNAL OF COLLOID AND INTERFACE SCIENCE 298 (2) 794-804, 2006
457. Tyagi B; Chudasama CD; Jasra RV
APPLIED CLAY SCIENCE 31 (1-2) 16-28, 2006
- KOMADEL,P. – JANEK,M. – MADEJOVÁ,J. – WEEKES,A. – BREEN,C. Acidity and catalytic activity of mildly acid-treated Mg-rich montmorillonite and hectorite. In *Journal of the Chemical Society-Faraday Transactions*. Vol.93, no.23 (1997), p.4207-4210
Citácie z WOS: 2
458. Tyagi B; Chudasama CD; Jasra RV
SPECTROCHIMICA ACTA A 64 (2) 273-278, 2006
459. Tyagi B; Chudasama CD; Jasra RV
APPLIED CLAY SCIENCE 31 (1-2) 16-28, 2006
- KOMADEL,P. – GRYGAR,T. – MEHNER,H. Reductive dissolution and Mössbauer spectroscopic study of Fe forms in the fine fractions of Slovak Fe-rich bentonites. In *Clay Minerals*. Vol.33, no.4 (1998), p.593-599
Citácie z WOS: 1
460. Favre F; Bogdal C; Gavillet S; Stucki JW
APPLIED CLAY SCIENCE 34 (1-4) 95-104, 2006
- Iné citácie: 1
461. Stucki J
PROPERTIES AND BEHAVIOR OF IRON IN CLAY MINERALS-HANDBOOK OF CLAY SCIENCE, 2006
- KOMADEL,P. Structure and chemical characteristic of modified clays. In *Natural Microporous Materials in Environmental Technology*. (1999), p.3-18
Citácie z WOS: 2
462. Klopogge JT
APPLIED CLAY SCIENCE 31 (3-4) 165-179, 2006
463. Tsai WT; Lai CW; Hsien KJ
JOURNAL OF COLLOID AND INTERFACE SCIENCE 297 (2) 749-754, 2006
- Iné citácie: 1
464. Stucki JW
PROPERTIES AND BEHAVIOR OF IRON IN CLAY MINERALS-HANDBOOK OF CLAY SCIENCE, 2006
- KOMADEL,P. – MADEJOVÁ,J. – STUCKI,JW. Partial stabilization of Fe(II) in reduced ferruginous smectite by lithium fixation. In *Clays and Clay Minerals*. Vol.47, no.4 (1999), p.458-465
Citácie z WOS: 1
465. Wilson J; Cressey G; Cressey B; Cuadros J; Ragnarsdottir KV; Savage D; Shibata M
GEOCHIMICA ET COSMOCHIMICA ACTA 70 (2) 323-336, 2006
- KOMADEL,P. – HROBÁRIKOVÁ,J. – SMRČOK,I. – KOPPELHUBER-BITSCHNAU,B. Hydration of reduced-charge montmorillonite. In *Clay Minerals*. Vol.37, no.3 (2002), p.543-550
Citácie z WOS: 1
466. Zemanova A; Link G; Takayama S; Nuesch R; Janek M
APPLIED CLAY SCIENCE 32 (3-4) 271-282, 2006

KOMADEL,P. Chemically modified smectites. In *Clay Minerals*. Vol.38, no.1 (2003), p.127-138

Citácie z WOS: 4

467. Vukovic Z; Milutonovic A; Rozic L; Rosic A; Nedic Z; Jovanovic D
CLAYS AND CLAY MINERALS 54 (6) 697-702, 2006
468. Kooli F; Hian PC; Weirong Q; Alshahateet SR; Chen FX
JOURNAL OF POROUS MATERIALS 13 (3-4) 319-324, 2006
469. Vlasova M; Leon I; Dominguez-Patino G; Kakazey M; Dorniguez-Patino M; Mendez YE; Nikolic M; Ristic MM
SILICATES INDUSTRIELS 71 (3-4) 39-47, 2006
470. Temuujin J; Senna M; Jadambaa T; Burmaa D; Erdenechimeg S; MacKenzie KJ
JOURNAL OF CHEMICAL TECHNOLOGY AND BIOTECHNOLOGY 81 (4) 688-693, 2006

KOMADEL,P. – MADEJOVÁ,J. – HROBÁRIKOVÁ,J. – JANEK,M. – BUJDÁK,J. Fixation of Li⁺ cations in montmorillonite upon heating. In *Solid State Phenomena*. Vol.90-91 (2003), p.395-400

Iné citácie: 1

471. Heller-Kallai L
THERMALLY MODIFIED CLAY MINERALS-HANDBOOK OF CLAY SCIENCE, 2006

KOMADEL,P. – MADEJOVÁ,J. – BUJDÁK,J. Preparation and properties of reduced-charge smectites - A review. In *Clays and Clay Minerals*. Vol.53, no.4 (2005), p.313-334

Citácie z WOS: 1

472. Zemanova A; Link G; Takayama S; Nuesch R; Janek M
APPLIED CLAY SCIENCE 32 (3-4) 271-282, 2006

KONETSCHNY,C. – GALUSEK,D. – RESCHKE,S. – FASEL,C. – RIEDEL,R. Dense silicon carbonitride ceramics by pyrolysis of cross-linked and warm pressed polysilazane powders. In *Journal of the European Ceramic Society*. Vol.19, no.16 (1999), p.2789-2796

Citácie z WOS: 2

473. Cheng F; Kelly SM; Clark S; Bradley JS; Baurnbachb M; Schutze A
JOURNAL OF MEMBRANE SCIENCE 280 (1-2) 530-535, 2006
474. Ishihara S; Bill J; Aldinger F; Shinoda Y; Wakai F; Nishimura T; Tanaka H
JOURNAL OF THE CERAMIC SOCIETY OF JAPAN 114 (1330) 575-579, 2006

KOŮŠ,M. – STEINER,B. – LANGER,V. – GYEPESOVÁ,D. – ŽURÍK,M. Preparation and structure determination of two sugar amino acids via corresponding hydantoin derivatives. In *Carbohydrate Research*. Vol.328, no.2 (2000), p.115-126

Citácie z WOS: 1

475. Bleriot Y; Simone MI; Wormald MR; Dwek RA; Watkin DJ; Fleet GWJ
TETRAHEDRON 17 (15) 2276-2286, 2006

KOŮŠ,M. – STEINER,B. – MIČOVÁ,J. – LANGER,V. – ŽURÍK,M. – GYEPESOVÁ,D. Synthesis and structure determination of some sugar amino acids related to alanine and 6-deoxymannojirimycin. In *Carbohydrate Research*. Vol.332, no.4 (2001), p.351-361

Citácie z WOS: 1

476. Bleriot Y; Simone MI; Wormald MR; Dwek RA; Watkin DJ; Fleet GWJ
TETRAHEDRON-ASYMMETRY 17 (15) 2276-2286, 2006

KOVALČÍK,J. – HVIZDOŠ,P. – DUSZA,A. – ŠAJGALÍK,P. – HNATKO,M. – REECE,M. Short-term high temperature deformation and recovery in Si₃N₄ based materials. In *Kovové Materiály-Metallic Materials*. Vol.41, no.6 (2003), p.377-388

Citácie z WOS: 1

477. Gondar E Gabrisova Z, Rosko M, Zemankova M
KOVOVÉ MATERIÁLY-METALLIC MATERIALS 44 (2) 113-118, 2006

KUBÍKOVÁ,B. – DANĚK,V. Surface tension of melts of the system KF + K₂NbF₇+Nb₂O₅. In *Journal of Chemical and Engineering Data*. Vol.50, no.4 (2005), p.1434-1437

Citácie z WOS: 1

478. Boca M; Ivanova Z; Kucharik M; Cibulkova J; Vasiljev R; Chrenkova M
ZEITSCHRIFT FÜR PHYSIKALISCHE CHEMIE 220 (9) 1159-1180, 2006

KUCHARSKI,SA. – NOGA,J. – BARTLETT,RJ. Dipole moment of IF and other interhalogen molecules. In *Journal of Chemical Physics*. Vol.88, no.2 (1988), p.1035-1040

Citácie z WOS: 1

479. Xenides D; Maroulis G
JOURNAL OF PHYSICS B 39 (17) 3629-3638, 2006

LANGER,V. – SCHOLTZO VÁ,E. – GYEPESOVÁ,D. – KOHÚTOVÁ,M. - VALENT A. (1-methylimidazole)(N-salicylidene-rac-glutamato)copper(II). In *Acta Crystallographica E*. Vol.59 (2003), p.1181-1183

Citácie z WOS: 2

480. Breza M; Biskupic S
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM 770 (1-3) 139-144, 2006
 481. Breza M; Biskupic S
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM 760 (1-3) 141-145, 2006
- LANGER,V. – SMRČOK,I. – MASUDA,Y. Pseudo-merohedrally twinned praseodymium hexacyanoferrate(III) tetrahydrate. In *Acta Crystallographica C*. Vol. 60 (2004), p.104-106
Citácie z WOS: 1
482. Kavecansky V; Mihalik M; Mat'as S; Mitroova Z; Lukacova M
ZEITSCHRIFT FÜR KRISTALLOGRAPHIE 543-548, 2006
- LANGER,V. – GYEPESOVÁ,D. – SCHOLTZOVÁ,E. – MACH,P. – KOHÚTOVÁ,M. – VALENT,A. – SMRČOK,I.
Crystal and electronic structure of aqua(*N*-salicylidene-methylester-L-glutamato)Cu(II) monohydrate. In *Zeitschrift für Kristallographie*. Vol.219, no.2 (2004), p.112-116
Citácie z WOS: 2
483. Breza M; Biskupic S
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM 770 (1-3) 139-144, 2006
 484. Breza M; Biskupic S
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM 760 (1-3) 141-145, 2006
- LANGER,V. – SCHOLTZOVÁ,E. – GYEPESOVÁ,D. – KOHÚTOVÁ,M. – VALENT,A. (*N*-salicylidene-D,L-glutamato)(2-methylimidazole)copper(II). In *Acta Crystallographica E*. Vol.60 (2004), p.129-132
Citácie z WOS: 3
485. Wang Q; Qiu XY
ACTA CRYSTALLOGRAPHICA E 62 3004-3005, 2006
 486. Breza M; Biskupic S
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM 770 (1-3) 139-144, 2006
 487. Breza M; Biskupic S
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM 760 (1-3) 141-145, 2006
- LANGER,V. – KOŮŠ,M. – GYEPESOVÁ,D. – SLÁDKOVIČOVÁ,M. – LUSTOŇ,J. – KRONEK,J. Three isomeric forms of hydroxyphenyl-2-oxazoline: 2-(2-hydroxyphenyl)-2-oxazoline, 2-(3-hydroxyphenyl)-2-oxazoline and 2-(4-hydroxyphenyl)-2-oxazoline. In *Acta Crystallographica C*. Vol.61 (2005), 602-606, 2005
Citácie z WOS: 1
488. Decken A; Botelho L; Sadowy AL; Yadav PN; Gossage RA
ACTA CRYSTALLOGRAPHICA E 62 5414-5416, 2006
- LANGER,V. – GYEPESOVÁ,D. – SCHOLTZOVÁ,E. – LUSTOŇ,J. – KRONEK,J. – KOŮŠ,M. 2-(4-hydroxyphenyl)-4,4-dimethyl-2-oxazoline: X-ray and density functional theory study. In *Acta Crystallographica C*. Vol.62 (2006), p.416-418
Citácie z WOS: 1
489. Decken A; Botelho L; Sadowy AL; Yadav PN; Gossage RA
ACTA CRYSTALLOGRAPHICA E 62 5414-5416, 2006
- LENČEŠ,Z. – BELLOSI,A. – MONTEVERDE,F. Factors influencing the crystallization and the densification of ultrafine Si/N/C powders. In *Materials Chemistry and Physics*. Vol.41, no.1 (1995), p.46-54
Citácie z WOS: 1
490. Wen G; Li F; Song L
MATERIALS SCIENCE AND ENGINEERING A 432 (1-2) 40-46, 2006
- LENČEŠ,Z. – ŠAJGALÍK,P. – RONCARI,E. – HIRAO,K. Design of Si₃N₄ based layered composites for multifunctional application. In *Key Engineering Materials*. Vol.175-176 (2000), p.173-182
Citácie z WOS: 1
491. Carman A; Pereloma E; Cheng YB
JOURNAL OF THE AMERICAN CERAMIC SOCIETY 89 (2) 478-483, 2006
- LICHVÁR,P. – LIŠKA,M. – GALUSEK,D. What is the true Kramers-Kronig transform? In *Ceramics-Silikáty*. Vol.46, no.1 (2002), p.25-27
Citácie z WOS: 2
492. King FW
JOURNAL OF PHYSICS A 39 (33) 10427-10435, 2006
 493. Shtrauss V
SIGNAL PROCESSING 86 (10) 2887-2900, 2006
- LII,DF. – HUANG,JL. – JEN,IJ. – LIN,SS. – ŠAJGALÍK,P. Effects of annealing on the properties of indium tin oxide films prepared by ion beam sputtering. In *Surface and Coatings Technology*. Vol.192, no.1 (2005), p.106-111
Citácie z WOS: 5

494. Lavareda G; de Carvalho CN; Fortunato E; Ramos AR; Alves E; Conde O; Amaral A
JOURNAL OF NON-CRYSTALLINE SOLIDS 352 (23-25) 2311-2314, 2006
 495. Lucas B; Rammal W; Moliton A
EUROPEAN PHYSICAL JOURNAL 34 (3) 179-187, 2006
 496. Kim JH; Jeon KA; Kim GH; Lee SY
APPLIED SURFACE SCIENCE 252 (13) 4834-4837, 2006
 497. Kim MS; Lee HD; Kim CK
JOURNAL OF INDUSTRIAL AND ENGINEERING CHEMISTRY 12 (3) 430-437, 2006
 498. Guillen C; Herrero J
VACUUM 80 (6) 615-620, 2006
- Citácie zo SCO: 1
499. Kerkache L; Layadi A; Dogheche E; Rémiens D
JOURNAL OF PHYSICS D 39 (1) 184-189, 2006
- Iné citácie: 1
500.
PROCEEDINGS OF SPIE - THE INTERNATIONAL SOCIETY FOR OPTICAL ENGINEERING Art. No. 61921M, 2006
- LIN,SS. – HUANG,JL. – ŠAJGALÍK,P. The properties of heavily Al-doped ZnO films before and after annealing in the different atmosphere. In *Surface and Coatings Technology*. Vol.185, no.2-3 (2004), p.254-263
- Citácie z WOS: 6
501. Zhou X; Gu SL; Wu Z; Zhu SM; Ye JD; Liu SM; Zhang R; Shi Y; Zheng YD
APPLIED SURFACE SCIENCE 253 (4) 2226-2229, 2006
 502. Lu JG; Ye ZZ; Zeng YJ; Zhu LP; Wang L; Yuan J; Zhao BH; Liang QL
JOURNAL OF APPLIED PHYSICS 100 (7) Art. No. 073714, 2006
 503. Xue SW; Zu XT; Zheng WG; Chen MY; Xiang X
PHYSICA B-CONDENSED MATTER 382 (1-2) 201-204, 2006
 504. Zhao P; Xia YB; Wang LJ; Liu JM; Xu R; Peng HY; Shi WM
TRANSACTIONS OF NONFERROUS METALS SOCIETY OF CHINA A 16 310-312, 2006
 505. Li L; Fang L; Liao KJ; Fu GZ; Yang FF; Liu GB; Zhang RJ; Cao CL; Chen WM
JOURNAL OF CRYSTAL GROWTH 287 (1) 101-104, 2006
 506. Bhosle V; Tiwari A; Narayan J
APPLIED PHYSICS LETTERS 88 (3) Art. No. 032106, 2006
- LIN,SS. – HUANG,JL. – ŠAJGALÍK,P. Effects of substrate temperature on the properties of heavily Al-doped ZnO films by simultaneous RF and DC magnetron sputtering. In *Surface and Coatings Technology*. Vol.190, 1 (2005), p.39-47
- Citácie z WOS: 2
507. Kim S; Jeon J; Kim HW; Lee JG; Lee C
CRYSTAL RESEARCH AND TECHNOLOGY 41 (12) 1194-1197, 2006
 508. Sun YF; Liu WF; He ZD; Liu SL; Yi ZZ; Du GT
VACUUM 80 (9) 981-985, 2006
- LIN,SS. – HUANG,JL. – ŠAJGALÍK,P. The properties of Ti-doped ZnO films deposited by simultaneous RF and DC magnetron sputtering. In *Surface and Coatings Technology*. Vol.191, no.2-3 (2005), p.286-292
- Citácie z WOS: 1
509. Kim SH; Moon YK; Moon DY; Hong MS; Jeon YJ; Park JW; Jeong CH
JOURNAL OF THE KOREAN PHYSICAL SOCIETY 49 (3) 1256-1259, 2006
- LIŠKA,M. – HULÍNOVÁ,H. – ŠIMURKA,P. – ANTALÍK,J. Infrared spectra of glasses in the $15\text{Na}_2\text{O} \cdot 10(\text{MgO}, \text{CaO}, \text{TiO}_2, \text{ZrO}_2) \cdot 75\text{SiO}_2$ system. In *Ceramics-silikáty*. Vol.39, no.1 (1995), p.20-29
- Citácie z WOS: 1
510. Karell R; Kraxner J; Chromcikova M
CERAMICS-SILIKATY 50 (2) 78-82, 2006
- LIŠKA,M. – ŠIMURKA,P. Viscosity of the glass forming melts in $15\text{Na}_2\text{O} \cdot 10(\text{MgO}, \text{CaO}, \text{TiO}_2, \text{ZrO}_2) \cdot 75\text{SiO}_2$ system. In *Physics and Chemistry of Glasses*. Vol. 36, no.1 (1995), p.6-11
- Citácie z WOS: 1
511. Karell R; Kraxner J; Chromcikova M
CERAMICS-SILIKATY 50 (2) 78-82, 2006
- LIŠKA,M. – ŠTUBŇA,I. – ANTALÍK,J. – PERICHTA,P. Structural relaxation with viscous flow followed by thermomodilatometry. In *Ceramics-silikáty*. Vol.40, no.1 (1996), p.15-19 Citácie z WOS: 1
512. Chromcikova M; Dej P
CERAMICS-SILIKATY 50 (3) 125-129, 2006
- LIŠKA,M. – KLYUEV,VP. – ANTALÍK,J. – ŠTUBŇA,I. Thermomodilatometry and structural relaxation of $\text{Na}_2\text{O} \cdot 2\text{SiO}_2 - \text{Na}_2\text{O} \cdot 2\text{TiO}_2$ glasses. In *Ceramics-silikáty*. Vol.40, no.3 (1996), p.85-91

Citácie z WOS: 1

513. Chromcikova M; Dej P
CERAMICS-SILIKATY 50 (3) 125-129, 2006

LIŠKA M. – CHROMČÍKOVÁ M. Simultaneous volume and enthalpy relaxation. The effect of experimental conditions. In *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*. Vol.81, no.1 (2005), p.125-129

Citácie z WOS: 1

514. Slobodian P; Riha P; Rychwalski RW; Emri I; Saha P; Kubat J
EUROPEAN POLYMER JOURNAL 42 (10) 2824-2837, 2006

LIŠKA M. – KLEMENT R. – MACHÁČEK J. – GEDEON O. Inverse thermodynamic modelling of glass from raman spectroscopical and molecular dynamics results. In *Physics and Chemistry of Glasses*. Vol.46, no.2 (2005), p.108-111

Citácie z WOS: 1

515. Karel R; Kraxner J; Chromcikova M
CERAMICS-SILIKATY 50 (2) 78-82, 2006

MADEJOVÁ J. – KOMADEL P. – ČÍČEL B. Infrared spectra of some Czech and Slovak smectites and their correlation with structural formulas. In *Geologica Carpathica C*. Vol.43, no.1 (1992), p.9-12

Citácie z WOS: 2

516. Tyagi B; Chudasama CD; Jasra RV
SPECTROCHIMICA ACTA PART A 64 (2) 273-278, 2006
517. Tyagi B; Chudasama CD; Jasra RV
APPLIED CLAY SCIENCE 31 (1-2) 16-28, 2006

Iné citácie: 1

518. Stucki JW
PROPERTIES AND BEHAVIOR OF IRON IN CLAY MINERALS-HANDBOOK OF CLAY SCIENCE, 2006

MADEJOVÁ J. – PUTYERA K. – ČÍČEL B. Proportion of central atoms in octahedral of smectites calculated from infrared spectra. In *Geologica Carpathica C*. Vol.43, no.2 (1992)

Citácie z WOS: 1

519. Dainyak LG; Drits VA; Zviagina BB; Lindreen H
AMERICAN MINERALOGIST 91 (4) 589-603, 2006

MADEJOVÁ J. – BEDNÁRIKOVÁ E. – KOMADEL P. – ČÍČEL B. Structural study of acid treated smectites by IR spectroscopy. In *Proceedings 11th Conference Clay Mineralogy and Petrology*. (1993), p.267-272

Citácie z WOS: 1

520. Ferrahi MI; Belbachir M
JOURNAL OF APPLIED POLYMER SCIENCE 102 (2) 1240-1243, 2006

Iné citácie: 1

521. Stucki JW
PROPERTIES AND BEHAVIOR OF IRON IN CLAY MINERALS-HANDBOOK OF CLAY SCIENCE, 2006

MADEJOVÁ J. – KOMADEL P. – ČÍČEL B. Infrared study of octahedral site populations in smectites. In *Clay Minerals*. Vol.29, no.3 (1994), p.319-326

Citácie z WOS: 6

522. Vukovic Z; Milutonic A; Rozic L; Rosic A; Nedic Z; Jovanovic D
CLAYS AND CLAY MINERALS 54 (6) 697-702, 2006
523. Klinkenberg M; Dohrmann R; Kaufhold S; Stanjek H
APPLIED CLAY SCIENCE 33 (3-4) 195-206, 2006
524. Juillot F; Morin G; Ildefonse P; Calas G; Brown GE
AMERICAN MINERALOGIST 91 (8-9) 1432-1441, 2006
525. Lee K; Kostka JE; Stucki JW
CLAYS AND CLAY MINERALS 54 (2) 195-208, 2006
526. Dainyak LG; Drits VA; Zviagina BB; Lindreen H
AMERICAN MINERALOGIST 91 (4) 589-603, 2006
527. Wilson J; Cressey G; Cressey B; Cuadros J; Ragnarsdottir KV; Savage D; Shibata M
GEOCHIMICA ET COSMOCHIMICA ACTA 70 (2) 323-336, 2006

Iné citácie: 3

528. Stucki JW
PROPERTIES AND BEHAVIOR OF IRON IN CLAY MINERALS-HANDBOOK OF CLAY SCIENCE, 2006
529. Gates WP
X-ray ABSORPTION SPECTROSCOPY- HANDBOOK OF CLAY SCIENCE, 2006
530. Petit S
FOURIER TRANSFORM INFRARED SPECTROSCOPY-HANDBOOK OF CLAY SCIENCE, 2006

MADEJOVÁ,J. – KRAUS,I. – KOMADEL,P. Fourier transform infrared spectroscopic characterization of dioctahedral smectites and illites from the main Slovak deposits. In *Geologica Carpathica C*. Vol.46, no.4 (1995), p.233-32

Iné citácie: 1

531. Stucki JW
PROPERTIES AND BEHAVIOR OF IRON IN CLAY MINERALS-HANDBOOK OF CLAY SCIENCE, 2006

MADEJOVÁ,J. – BUJDÁK,J. – GATES,WP. – KOMADEL,P. Preparation and infrared spectroscopic characterization of reduced-charge montmorillonite with various Li contents. In *Clay Minerals*. Vol.31, no.2 (1996), p.233-241

Citácie z WOS: 1

532. Shah RK; Paul DR
MACROMOLECULES 39 (9) 3327-3336, 2006

MADEJOVÁ,J. – BUJDÁK,J. – JANEK,M. – KOMADEL,P. Comparative FT-IR study of structural modifications during acid treatment of dioctahedral smectites and hectorite. In *Spectrochimica Acta A*. Vol.54, no.10 (1998), p.1397-1406

Citácie z WOS: 10

533. Vukovic Z; Milutonic A; Rozic L; Rosic A; Nedic Z; Jovanovic D
CLAYS AND CLAY MINERALS 54 (6) 697-702, 2006
534. Yadav MK; Jasra RV
CATALYSIS COMMUNICATIONS 7 (11) 889-895, 2006
535. Hassan MS; Baoumy HM
CLAYS AND CLAY MINERALS 54 (4) 491-499, 2006
536. Tyagi B; Chudasama CD; Jasra RV
SPECTROCHIMICA ACTA A 64 (2) 273-278, 2006
537. Gournis D; Jankovic L; Maccallini E; Benne D; Rudolf P; Colomer JF; Sooambar C; Georgakilas V; Prato M; Fanti M; Zerbetto F; Sarova GH; Guldi DM
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 128 (18) 6154-6163, 2006
538. Jozefaciuk G; Matyka-Sarzynska D
CLAYS AND CLAY MINERALS 54 (2) 220-229, 2006
539. Temuujin J; Senna M; Jadambaa T; Burmaa D; Erdenechimeg S; MacKenzie KJ
JOURNAL OF CHEMICAL TECHNOLOGY AND BIOTECHNOLOGY 81 (4) 688-693, 2006
540. Okada K; Arimitsu N; Karneshima Y; Nakajima A; MacKenzie KJD
APPLIED CLAY SCIENCE 31 (3-4) 185-193, 2006
541. Yang HM; Du CF; Hu YH; Jin SM; Yang WG; Tang AD; Avvakumov EG
APPLIED CLAY SCIENCE 31 (3-4) 290-297, 2006
542. Tyagi B; Chudasama CD; Jasra RV
APPLIED CLAY SCIENCE 31 (1-2) 16-28, 2006

Iné citácie: 1

543. Stucki JW
PROPERTIES AND BEHAVIOR OF IRON IN CLAY MINERALS-HANDBOOK OF CLAY SCIENCE, 2006

MADEJOVÁ,J. – ARVAIOVÁ,B. – KOMADEL,P. FTIR spectroscopic characterization of thermally treated Cu²⁺, Cd²⁺, and Li⁺ montmorillonites. In *Spectrochimica Acta A*. Vol.55, no.12 (1999), p.2467-2476

Citácie z WOS: 5

544. Kumarraja M; Pitchumani K
JOURNAL OF MOLECULAR CATALYSIS A-CHEMICAL 256 (1-2) 138-142, 2006
545. Friedrich F; Gasharova B; Mathis YL; Nuesch R; Weidler PG
APPLIED SPECTROSCOPY 60 (7) 723-728, 2006
546. Zemanova A; Link G; Takayama S; Nuesch R; Janek M
APPLIED CLAY SCIENCE 32 (3-4) 271-282, 2006
547. Klopogge JT; Mahmutagic E; Frost RL
JOURNAL OF COLLOID AND INTERFACE SCIENCE 296 (2) 640-646, 2006
548. Wang AQ; D'Souza N; Golden TD
JOURNAL OF MATERIALS CHEMISTRY 16 (5) 481-488, 2006

MADEJOVÁ,J. – BUJDÁK,J. – PETIT,S. – KOMADEL,P. Effects of chemical composition and temperature of heating on the infrared spectra of Li-saturated dioctahedral smectites. (I) Mid-infrared region. In *Clay Minerals*. Vol.35, no.5 (2000), p.739-751

Citácie z WOS: 3

549. Zemanova A; Link G; Takayama S; Nuesch R; Janek M
APPLIED CLAY SCIENCE 32 (3-4) 271-282, 2006
550. Shah RK; Paul DR
MACROMOLECULES 39 (9) 3327-3336, 2006
551. Klopogge JT
APPLIED CLAY SCIENCE 31 (3-4) 165-179, 2006

Iné citácie: 1

552. Heller-Kallai L
THERMALLY MODIFIED CLAY MINERALS-HANDBOOK OF CLAY SCIENCE, 2006

MADEJOVÁ J. – BUJDÁK J. – PETIT, S. – KOMADEL, P. Effects of chemical composition and temperature of heating on the infrared spectra of Li-saturated dioctahedral smectites. (II) Near-infrared region. In *Clay Minerals*. Vol.35, no.5 (2000), p.753-761

Citácie z WOS: 2

553. Zemanova A; Link G; Takayama S; Nuesch R; Janek M
APPLIED CLAY SCIENCE 32 (3-4) 271-282, 2006
554. Klopogge JT
APPLIED CLAY SCIENCE 31 (3-4) 165-179, 2006

Iné citácie: 1

555. Heller-Kallai L
THERMALLY MODIFIED CLAY MINERALS-HANDBOOK OF CLAY SCIENCE, 2006

MADEJOVÁ J. – KOMADEL, P. Baseline studies of the Clay Minerals Society Source Clays: Infrared methods. In *Clays and Clay Minerals*. Vol.49, no.5 (2001), p.410-432

Citácie z WOS: 18

556. Zhang Z; Shi Q; Peng J; Song JB; Chen QY; Yang JL; Gong YM; Ji RH; He XF; Lee JH
POLYMER 47 (26) 8548-8555, 2006
557. Navratilova Z; Vaculikova L
CHEMICAL PAPERS-CHEMICKE ZVESTI 60 (5) 348-352, 2006
558. Klinkenberg M; Dohrmann R; Kaufhold S; Stanjek H
APPLIED CLAY SCIENCE 33 (3-4) 195-206, 2006
559. Thongnopkun P; Ekgasit S
ANALYTICA CHIMICA ACTA 576 (1) 130-135, 2006
560. Bauer A; Lanson B; Ferrage E; Emmerich K; Taubald H; Schild D; Velde B
AMERICAN MINERALOGIST 91 (8-9) 1313-1322, 2006
561. Mashburn CD; Frinak EK; Tolbert MA
JOURNAL OF GEOPHYSICAL RESEARCH D 111 (15) Art. No. 15213, 2006
562. Butler IS; Frost RL
APPLIED SPECTROSCOPY REVIEWS 41 (5) 449-471, 2006
563. Gionis V; Kacandes GH; Kastritis ID; Chrysikos GD
AMERICAN MINERALOGIST 91 (7) 1125-1133, 2006
564. Zemanova A; Link G; Takayama S; Nuesch R; Janek M
APPLIED CLAY SCIENCE 32 (3-4) 271-282, 2006
565. Christidis GE
AMERICAN MINERALOGIST 91 (4) 685-701, 2006
566. Michalski JR; Kraft MD; Sharp TG; Williams LB; Christensen PR
JOURNAL OF GEOPHYSICAL RESEARCH E 111 (3) Art. No. 03004, 2006
567. Pieper H; Bosbach D; Panak PJ; Rabung T; Fanghanel T
CLAYS AND CLAY MINERALS 54 (1) 45-53, 2006
568. Dogan AU; Dogan M; Onal M; Sarikaya Y; Aburub A; Wurster DE
CLAYS AND CLAY MINERALS 54 (1) 62-66, 2006
569. Wang AQ; D'Souza N; Golden TD
JOURNAL OF MATERIALS CHEMISTRY 16 (5) 481-488, 2006
570. Yuan P; He HP; Bergaya F; Wu DQ; Zhou Q; Zhu JX
MICROPOROUS AND MESOPOROUS MATERIALS 88 (1-3) 8-15, 2006
571. Katti KS; Sikdar D; Katti DR; Ghosh P; Verma D
POLYMER 47 (1) 403-414, 2006
572. Katti KS; Katti DR
LANGMUIR 22 (2) 532-537, 2006
573. Suarez M; Garcia-Romero E
APPLIED CLAY SCIENCE 31 (1-2) 154-163, 2006

MADEJOVÁ J. – KEČKÉŠ, J. – PÁLKOVÁ, H. – KOMADEL, P. Identification of components in smectite/kaolinite mixtures. In *Clay Minerals*. Vol.37, no.2 (2002), p.377-388

Citácie z WOS: 2

574. Needham SJ; Worden RH; Cuadros J
SEDIMENTOLOGY 53 (3) 567-579, 2006
575. Cuadros J; Dudek T
CLAYS AND CLAY MINERALS 54 (1) 1-11, 2006

Iné citácie: 2

576. Środoń J
IDENTIFICATION AND QUANTITATIVE ANALYSIS OF CLAY MINERALS- HANDBOOK OF CLAY SCIENCE, 2006

577. Petit S
FOURIER TRANSFORM INFRARED SPECTROSCOPY-HANDBOOK OF CLAY SCIENCE, 2006
- MADEJOVÁ J. – JANEK M. – KOMADEL P. – HERBERT HJ. – MOOG HC. FTIR analyses of water in MX-80 bentonite compacted from high salinity salt solution systems. In *Applied Clay Science*. Vol.20, no.6 (2002), p.255-271
Citácie z WOS: 1
578. He HP; Yang D; Yuan P; Shen W; Frost RL
JOURNAL OF COLLOID AND INTERFACE SCIENCE 297 (1) 235-243, 2006
- MADEJOVÁ J. FTIR techniques in clay mineral studies. In *Vibrational Spectroscopy*. Vol.31, no.1 (2003), p.1-10
Citácie z WOS: 20
579. Bourikas K; Kordulis C; Lycourghiotis A
CATALYSIS REVIEWS-SCIENCE AND ENGINEERING 48 (4) 363-444, 2006
580. Akyuz S; Akyuz T
VIBRATIONAL SPECTROSCOPY 42 (2) 387-391, 2006
581. Feng L; Yang M; Wang G
CHEMICAL JOURNAL OF CHINESE UNIVERSITIES 27 (11) 2213-2216, 2006
582. Seki Y; Yurdakoc K
JOURNAL OF THE INTERNATIONAL ADSORPTION SOCIETY 12 (1) 89-100, 2006
583. Navratilova Z; Vaculikova L
CHEMICAL PAPERS-CHEMICKE ZVESTI 60 (5) 348-352, 2006
584. Al-Degs YS; El-Barghouthi MI; Issa AA; Khraisheh MA; Walker GM
WATER RESEARCH 40 (14) 2645-2658, 2006
585. Gionis V; Kacandes GH; Kastiris ID; Chrysikos GD
AMERICAN MINERALOGIST 91 (7) 1125-1133, 2006
586. Gopalan AY; Lee KP; Hong MH; Santhosh P; Manesh KM; Kim SH
JOURNAL OF NANOSCIENCE AND NANOTECHNOLOGY 6 (6) 1594-1601, 2006
587. Krishantha DMM; Rajapakse RMG; Tennakoon DTB; Dias HVR
JOURNAL OF COMPOSITE MATERIALS 40 (11) 1009-1021, 2006
588. Gereli G; Seki Y; Kusoglu IM; Yurdakoc K
JOURNAL OF COLLOID AND INTERFACE SCIENCE 299 (1) 155-162, 2006
589. Bocchini S; Frache A; Camino G; Costantini E; Ferrara G; Fatinel F
POLYMERS FOR ADVANCED TECHNOLOGIES 17 (4) 246-254, 2006
590. Marder L; Tomedi P; Ferrao MF; Andre J; Davanzo CU
JOURNAL OF THE BRAZILIAN CHEMICAL SOCIETY 17 (3) 594-598, 2006
591. Patel HA; Somani RS; Bajaj HC; Jasra RV
BULLETIN OF MATERIALS SCIENCE 29 (2) 133-145, 2006
592. Ozcan A; Oncu EM; Ozcan AS
JOURNAL OF HAZARDOUS MATERIALS 129 (1-3) 244-252, 2006
593. Michalski JR; Kraft MD; Sharp TG; Williams LB; Christensen PR
JOURNAL OF GEOPHYSICAL RESEARCH E 111 (3) Art. No. 03004, 2006
594. He HP; Frost RL; Bostrom T; Yuan P; Duong L; Yang D; Yunfel XF; Klopogge JT
APPLIED CLAY SCIENCE 31 (3-4) 262-271, 2006
595. Wang AQ; D'Souza N; Golden TD
JOURNAL OF MATERIALS CHEMISTRY 16 (5) 481-488, 2006
596. Katti KS; Sikdar D; Katti DR; Ghosh P; Verma D
POLYMER 47 (1) 403-414, 2006
597. Cozzolino D; Moron A
SOIL AND TILLAGE RESEARCH 85 (1-2) 78-85, 2006
598. Frost RL; Mendelovici E
JOURNAL OF COLLOID AND INTERFACE SCIENCE 294 (1) 47-52, 2006
- MADEJOVÁ J. – KOMADEL P. Information available from infrared spectra of the fine fractions of bentonites. In *The Application of Vibrational Spectroscopy to Clay Minerals and Layered double Hydroxides*. Vol.13 (2004), p.65-98
Citácie z WOS: 2
599. Klinkenberg M; Dohrmann R; Kaufhold S; Stanjek H
APPLIED CLAY SCIENCE 33 (3-4) 195-206, 2006
600. Michalski JR; Kraft MD; Sharp TG; Williams LB; Christensen PR
JOURNAL OF GEOPHYSICAL RESEARCH E 111 (3) Art. No. 03004, 2006
- Iné citácie: 1
601. Petit S
FOURIER TRANSFORM INFRARED SPECTROSCOPY-HANDBOOK OF CLAY SCIENCE, 2006
- MAHMOUDKHANI, AH. – LANGER, V. – SMRČOK, I. Layered strontium phenylphosphonate: synthesis, thermal properties and crystal structure from X-ray powder diffraction data. In *Solid State Sciences*. Vol.4, no.6 (2002), p.873-878
Citácie z WOS: 5

602. Zima V; Svoboda J; Benes L; Melanova K; Trchova M
SOLID STATE SCIENCES 8 (11) 1380-1385, 2006
603. Midollini S; Lorenzo-Luis P; Orlandini A
INORGANICA CHIMICA ACTA 359 (10) 3275-3282, 2006
604. Demadis KD; Katarachia SD; Raptis RG; Zhao H; Baran P
CRYSTAL GROWTH & DESIGN 6 (4) 836-838, 2006
605. Salami TO; Fan X; Zavalij PY; Oliver SRJ
DALTON TRANSACTIONS (12) 1574-1578, 2006
606. Reddy BKK; Rao KP; Vidyasagar K
JOURNAL OF CHEMICAL SCIENCES 118 (1) 117-126, 2006

MALKIN,I. – MALKINA,OL. – MALKIN,VG. Relativistic calculations of electric field gradients using the Douglas-Kroll method. In *Chemical Physics Letters*. Vol.361, no.3-4 (2002), p.231-236

Citácie z WOS: 5

607. Reiher M
THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS 116 (1-3) 241-252, 2006
608. Bruna PJ; Grein F
MOLECULAR PHYSICS 104 (3) 429-446, 2006
609. Wolf A; Reiher M
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (6) Art. No. 064102, 2006
610. Wolf A; Reiher M
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (6) Art. No. 064103, 2006
611. Bahramy MS; Sluiter MHF; Kawazoe Y
PHYSICAL REVIEW B 73 (4) Art. No. 045111, 2006

MALKIN,I. – MALKINA,OL. – MALKIN,VG. – KAUPP,M. Scalar relativistic calculations of hyperfine coupling tensors using the Douglas-Kroll-Hess method. In *Chemical Physics Letters*. Vol.396, no.4-6 (2004), p.268-276

Citácie z WOS: 5

612. Flory MA; McLamarrah SK; Ziurys LM
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (19) Art. No. 194304, 2006
613. Reiher M
THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS 116 (1-3) 241-252, 2006
614. Wolf A; Reiher M
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (6) Art. No. 064102, 2006
615. Wolf A; Reiher M
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (6) Art. No. 064103, 2006
616. Bahramy MS; Sluiter MHF; Kawazoe Y
PHYSICAL REVIEW B 73 (4) Art. No. 045111, 2006

MALKIN,I. – MALKINA,OL. – MALKIN,VG. – KAUPP,M. Relativistic two-component calculations of electronic g-tensors that include spin polarization. In *Journal of Chemical Physics*. Vol.123, no.24 (2005), p.244103-1-244103-16

Citácie z WOS: 1

617. Wolf A; Reiher M
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (6) Art. No. 064103, 2006

MALKIN,VG. – MALKINA,OL. – SALAHUB,DR. Calculations of NMR shielding constants by uncoupled density functional theory. In *Chemical Physics Letters*. Vol.204, no.1-2 (1993), p.80-86

Citácie z WOS: 1

618. Heine T; Corminboeuf C; Grossmann G; Haeberlen U
ANGEWANDTE CHEMIE 45 (43) 7292-7295, 2006

MALKIN,VG. – MALKINA,OL. – SALAHUB,DR. Calculations of NMR shielding constants beyond uncoupled density functional theory. IGLO Approach. In *Chemical Physics Letters*. Vol.204, no.1-2 (1993), p.87-95

Citácie z WOS: 1

619. Sterzel M; Autschbach J
INORGANIC CHEMISTRY 45 (8) 3316-3324, 2006

MALKIN,VG. In *Master Program* (1994)

Citácie z WOS: 1

620. Lang J; Vagnerova K; Czernek J; Lhotak P
SUPRAMOLECULAR CHEMISTRY 18 (4) 371-381, 2006

MALKIN,VG. – MALKINA,OL. – SALAHUB,DR. Calculation of spin-spin coupling constants using density functional theory. In *Chemical Physics Letters*. Vol.221, no.1-2 (1994), p.91-99

Citácie z WOS: 4

621. Jensen F
JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION 2 (5) 1360-1369, 2006

622. Provasi PF; Sauer SPA
JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION 2 (4) 1019-1027, 2006
623. Keal TW; Helgaker T; Salek P; Tozer DJ
CHEMICAL PHYSICS LETTERS 425 (1-3) 163-166, 2006
624. Zalan Z; Kivela H; Lazar L; Fulop F; Pihlaja K
EUROPEAN JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY (9) 2145-2159, 2006

MALKIN,VG. – MALKINA,OL. – CASIDA,ME. – SALAHUB,DR. Nuclear magnetic resonance shielding tensors calculated with a sum-over-states density functional perturbation theory. In *Journal of the American Chemical Society*. Vol.116, no.13 (1994), p.5898-5908

Citácie z WOS: 15

625. d'Antuono P; Botek E; Champagne B
INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY 106 (15) 3113-3121, 2006
626. d'Antuono P; Botek E; Champagne B; Spassova M; Denkova P
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (14) Art. No. 144309, 2006
627. Wrackmeyer B; Tok OL
ZEITSCHRIFT FÜR NATURFORSCHUNG B 61 (8) 949-955, 2006
628. Neese F
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 128 (31) 10213-10222, 2006
629. Wiitala KW; Hoyer TR; Cramer CJ
JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION 2 (4) 1085-1092, 2006
630. Lang J; Vagnerova K; Czernek J; Lhotak P
SUPRAMOLECULAR CHEMISTRY 18 (4) 371-381, 2006
631. Yokojima S; Matsuda K; Irie M; Murakami A; Kobayashi T; Nakamura S
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (26) 8137-8143, 2006
632. Notario R; Roux MV; Cuevas G; Cardenas J; Leyva V; Juaristi E
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (24) 7703-7712, 2006
633. Hennig M; Munzarov ML; Bermel W; Scott LG; Sklenar V; Williamson JR
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 128 (17) 5851-5858, 2006
634. Zhang Y; Wu AN; Xu X; Yan YJ
CHEMICAL PHYSICS LETTERS 421 (4-6) 383-388, 2006
635. Wilcox CF
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM 759 (1-3) 125-132, 2006
636. Fallah-Bagher-Shaidaei H; Wannere CS; Corminboeuf C; Puchta R; Schleyer PV
ORGANIC LETTERS 8 (5) 863-866, 2006
637. Machacek J; Plešek J; Holub J; Hnyk D; Vsetecka V; Cisarova I; Kaupp M; Stibr B
DALTON TRANSACTIONS (8) 1024-1029, 2006
638. Proynov EI; Thakkar AJ
INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY 106 (2) 436-446, 2006
639. Sebastiani D
CHEMPHYSICHEM 7 (1) 164-175, 2006

MALKIN,VG. – MALKINA,OL. – ERIKSSON,LA.- SALAHUB,DR. The calculation of NMR and ESR spectroscopy parameters using density functional theory. In *Modern Density Functional Theory: Theoretical and Computational Chemistry*. Vol.2 (1995), p.273-347

Citácie z WOS: 9

640. Fritscher J; Prisner TF; MacMillan F
APPLIED MAGNETIC RESONANCE 30 (3-4) 251-268, 2006
641. Stipa P
CHEMICAL PHYSICS 323 (2-3) 501-510, 2006
642. Fallah-Bagher-Shaidaei H; Wannere CS; Corminboeuf C; Puchta R; Schleyer PV
ORGANIC LETTERS 8 (5) 863-866, 2006
643. Wiitala KW; Hoyer TR; Cramer CJ
JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION 2 (4) 1085-1092, 2006
644. Lang J; Vagnerova K; Czernek J; Lhotak P
SUPRAMOLECULAR CHEMISTRY 18 (4) 371-381, 2006
645. Hennig M; Munzarov ML; Bermel W; Scott LG; Sklenar V; Williamson JR
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 128 (17) 5851-5858, 2006
646. Potrzebowski MJ; Bujacz GD; Bujacz A; Olejniczak S; Napora P; Helinski J; Ciesielski W; Gajda J
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B 110 (2) 761-771, 2006
647. Machacek J; Plešek J; Holub J; Hnyk D; Vsetecka V; Cisarova I; Kaupp M; Stibr B
DALTON TRANSACTIONS (8) 1024-1029, 2006
648. Potrzebowski MJ; Helinski J; Olejniczak S; Ciesielski W
JOURNAL OF PHYSICAL ORGANIC CHEMISTRY 19 (1) 53-60, 2006

MALKIN,VG. – MALKINA,OL. – SALAHUB,DR. Influence of intermolecular interactions on the ¹³C NMR shielding tensor in solid α-glycine. In *Journal of the American Chemical Society*. Vol.117, no.11 (1995), p.3294-3295

Citácie z WOS: 2

- 649. Taylor RE; Chim N; Dybowski C
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE 794 (1-3) 133-137, 2006
- 650. Ilczyszyn M; Godzisz D; Ilczyszyn MM; Mierzwicki K
CHEMICAL PHYSICS 323 (2-3) 231-242, 2006

MALKIN,VG. – MALKINA,OL. – STEINEBRUNNER,G. – HUBER,H. Solvent effect on the NMR chemical shieldings in water calculated by a combination of molecular dynamics and density functional theory. In *Chemistry-A European Journal*. Vol.2, no.4 (1996), p.452-457

Citácie z WOS: 3

- 651. Cybulski H; Pecul M; Sadlej J
CHEMICAL PHYSICS 326 (2-3) 431-444, 2006
- 652. Cybulski H; Sadlej J
CHEMICAL PHYSICS 323 (2-3) 218-230, 2006
- 653. Buhl M; Grigoleit S; Kabrede H; Mauschick FT
CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL 12 (2) 477-488, 2006

MALKIN,VG. – MALKINA,OL. – SALAHUB,DR. Spin-orbit correction to NMR shielding constants from density functional theory. In *Chemical Physics Letters*. Vol.261, no.3 (1996), p.335-345

Citácie z WOS: 5

- 654. Lantto P; Romero RH; Gomez SS; Aucar GA; Vaara J
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (18) Art. No. 184113, 2006
- 655. Ootani Y; Yamaguti H; Maeda H; Fukui H
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (16) Art. No. 164106, 2006
- 656. Hnyk D; Buhl M; Holub J; Hayes SA; Wann DA; Mackie ID; Borisenko KB; Robertson HE; Rankin DWH
INORGANIC CHEMISTRY 45 (15) 6014-6019, 2006
- 657. Buhl M
MAGNETIC RESONANCE IN CHEMISTRY 44 (7) 661-668, 2006
- 658. Kudo K; Maeda H; Kawakubo T; Ootani Y; Funaki M; Fukui H
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (22) Art. No. 224106, 2006

MALKINA,OL. – SALAHUB,DR. – MALKIN,VG. Nuclear magnetic resonance spin-spin coupling constants from density functional theory: Problems and results. In *Journal of Chemical Physics*. Vol.105, no.19 (1996), p.8793-8800

Citácie z WOS: 7

- 659. Jensen F
JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION 2 (5) 1360-1369, 2006
- 660. Thorshaug K; Swang O; Dahl IM; Olafsen A
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (32) 9801-9804, 2006
- 661. Provasi PF; Sauer SPA
JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION 2 (4) 1019-1027, 2006
- 662. Keal TW; Helgaker T; Salek P; Tozer DJ
CHEMICAL PHYSICS LETTERS 425 (1-3) 163-166, 2006
- 663. Notario R; Roux MV; Cuevas G; Cardenas J; Leyva V; Juaristi E
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (24) 7703-7712, 2006
- 664. Raynaud C; Maron L; Daudey JP; Jolibois F
CHEMPHYSICHEM 7 (2) 407-413, 2006
- 665. Bagno A; Casella G; Saielli G
JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION 2 (1) 37-46, 2006

MALKINA,OL. – SCHIMMELPFENNIG,B. – KAUPP,M. – HESS,BA. – CHANDRA,P. – WAHLGREN,U. – MALKIN,VG. Spin-orbit corrections to NMR shielding constants from density functional theory. How important are the two-electron terms? In *Chemical Physics Letters*. Vol.296, no.1-2 (1998), p.93-104

Citácie z WOS: 6

- 666. Lantto P; Romero RH; Gomez SS; Aucar GA; Vaara J
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (18) Art. No. 184113, 2006
- 667. Roura PG; Melo JI; de Azua MCR; Giribet CG
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (6) Art. No. 064107, 2006
- 668. Neese F
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 128 (31) 10213-10222, 2006
- 669. Ganyushin D; Neese F
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (2) Art. No. 024103, 2006
- 670. Sterzel M; Autschbach J
INORGANIC CHEMISTRY 45 (8) 3316-3324, 2006
- 671. d'Antuono P; Botek E; Champagne B; Spassova M; Denkova P
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (14) Art. No. 144309, 2006

MALKINA,OL. – VAARA,J. – SCHIMMELPFENNIG,B. – MUNZAROVÁ,M. - MALKIN VG. – KAUPP,M. Density functional calculations of electronic g-tensors using spin-orbit pseudopotentials and/or mean-field all-electron spin-orbit operators. In *Journal of the American Chemical Society*. Vol.122, no.38 (2000), p.9206-9218

Citácie z WOS: 13

672. Barone V; Brustolon M; Cimino P; Polimeno A; Zerbetto M; Zoleo A
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 128 (49) 15865-15873, 2006
673. Barone V; Polimeno A
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 8 (40) 4609-4629, 2006
674. Zbiri M
INORGANICA CHIMICA ACTA 359 (12) 3865-3870, 2006
675. Bolvin H
CHEMPHYSCHEM 7 (7) 1575-1589, 2006
676. Sinnecker S; Neese F
JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY 27 (12) 1463-1475, 2006
677. Ganyushin D; Neese F
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (2) Art. No. 024103, 2006
678. Mattar SM; Sanford J
CHEMICAL PHYSICS LETTERS 425 (1-3): 148-153 JUL 3 2006
679. Pietrucci F; Bernasconi M; Di Valentin C; Mauri F; Pickard CJ
PHYSICAL REVIEW B 73 (13) Art. No. 134112, 2006
680. Pavone M; Cimino P; De Angelis F; Barone V
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 128 (13) 4338-4347, 2006
681. Declerck R; Van Speybroeck V; Waroquier M
PHYSICAL REVIEW B 73 (11) Art. No. 115113, 2006
682. Sinnecker S; Rajendran A; Klamt A; Diedenhofen M; Neese F
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (6) 2235-2245, 2006
683. Mattar SM; Sanford J; Goodfellow AD
CHEMICAL PHYSICS LETTERS 418 (1-3) 30-35, 2006
684. Garipov RR; Shtyrlin VG; Safin DA; Zyavkina YI; Sokolov FD; Konkin AL; Aganov AV; Zakharov AV
CHEMICAL PHYSICS 320 (2-3) 59-74, 2006

MALKINA,OL. – HRICOVÍNI,M. – BÍZIK,F. – MALKIN,VG. Chemical shifts and spin-spin coupling constants in Me α -D-xylopyranoside: A DFT approach. In *Journal of Physical Chemistry A*. Vol.105, no.40 (2001), p.9188-9195

Citácie z WOS: 2

685. Bagno A; Rastrelli F; Saielli G
CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL 12 (21) 5514-5525, 2006
686. Fischer JT; Reinscheid UM
EUROPEAN JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY (9) 2074-2080, 2006

MALKINA,OL. – MALKIN,VG. Visualization of nuclear spin-spin coupling pathways by real-space functions. In *Angewandte Chemie*. Vol.42, no.36 (2003), p.4335-4338 2003

Citácie z WOS: 5

687. Ye AJ; Autschbach J
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (23) Art. No. 234101, 2006
688. Geier J
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (29) 9273-9281, 2006
689. Jimeno ML; Alkorta I; Elguero J; Del Bene JE
MAGNETIC RESONANCE IN CHEMISTRY 44 (7) 698-707, 2006
690. Soncini A; Lazzeretti P
CHEMPHYSCHEM 7 (3) 679-684, 2006
691. Contreras RH; Esteban AL; Diez E; Head NJ; Della EW
MOLECULAR PHYSICS 104 (4) 485-492, 2006

MALKINA,OL. Interpretation of indirect nuclear spin-spin coupling constants. In *Calculation of NMR and EPR Parameters: Theory and Applications*. (2004), p.307-324

Citácie z WOS: 1

692. Soncini A; Lazzeretti P
CHEMPHYSCHEM 7 (3) 679-684, 2006

MEDVEĎ,M. – URBAN,M. - NOGA J. CCSD(T) expectation value calculations of first-order properties. In *Theoretical Chemistry Accounts*. Vol.98, no.2-3 (1997), p.75-84

Citácie z WOS: 1

693. Korona T; Jeziorski B
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (18) Art. No. 184109, 2006

MIČOVÁ,J. – STEINER,B. – KOŮŠ,M. – LANGER,V. – GYEPESOVÁ,D. Synthesis of 4-carbamoyl-2-oxazolidinones C-4-linked with a saccharide moiety via bucherer-bergs reaction of hexofuranos-5-uloses. In *Synlett*. no.10 (2002), p.1715-1717

Citácie z WOS: 2

- 694. Montagne C; Shiers JJ; Shipman M
TETRAHEDRON LETTERS 47 (52) 9207-9209, 2006
- 695. Montagne C; Shipman M
SYNLETT (14) 2203-2206, 2006

MIČOVÁ,J. – STEINER,B. – KOŮŠ,M.- LANGER,V. – GYEPESOVÁ,D. Characterisation and X-ray crystallography of products from the bucherer-bergs reaction of methyl 2,3-*O*-isopropylidene- α -D-lyxo-pentodialdo-1,4-furanoside. In *Carbohydrate Research*. Vol.338, no.19 (2003), p.1917-1924

Citácie z WOS: 2

- 696. Montagne C; Shiers JJ; Shipman M
TETRAHEDRON LETTERS 47 (52) 9207-9209, 2006
- 697. Montagne C; Shipman M
SYNLETT (14) 2203-2206, 2006

MICHALKOVÁ,A. – TUNEGA,D. – TURI NAGY,L. Theoretical study of interactions of dickite and kaolinite with small organic molecules. In *Journal of Molecular Structure –Theochem*. Vol.581 (2002), p.37-49

Citácie z WOS: 2

- 698. Boulet P; Greenwell HC; Stackhouse S; Coveney PV
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM 762 (1-3) 33-48, 2006
- 699. Tosoni S; Doll K; Ugliengo P
CHEMISTRY OF MATERIALS 18 (8) 2135-2143, 2006

MIKLOŠ,D. – SMRČOK,I. – DUROVIČ,S. – GYEPESOVÁ,D. – HANDLOVIČ,M. Refinement of the structure of borolucite, K/BSi_2O_6 . In *Acta Crystallographica C*. Vol.48, (1992), p.1831-1832

Citácie z WOS: 1

- 700. Krzhizhanovskaya MG; Bubnova RS; Filatov SK; Meyer DC; Paufler P
CRYSTAL RESEARCH AND TECHNOLOGY 41 (3) 285-292, 2006

MÜLLER,H. – KUTZELNIGG,W. – NOGA,J. – KLOPPER,W. CH^+_5 : The story goes on. An explicitly correlated coupled cluster study. In *Journal of Chemical Physics*. Vol.106, no.5 (1997), p.1863-1869

Citácie z WOS: 7

- 701. Fleming FP; Barbosa AGH; Esteves PM
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (43) 11903-11905, 2006
- 702. Okulik NB; Peruchena NM; Jubert AH
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (32) 9974-9982, 2006
- 703. Spirko V; Amano T; Kraemer WP
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (24) Art. No. 244303, 2006
- 704. McCoy AB
INTERNATIONAL REVIEWS IN PHYSICAL CHEMISTRY 25 (1-2) 77-107, 2006
- 705. Padma KP; Marx D
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 8 (5) 573-586, 2006
- 706. Jin Z; Braams BJ; Bowman JM
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (4) 1569-1574, 2006
- 707. Huang XC; McCoy AB; Bowman JM; Johnson LM; Savage C; Dong F; Nesbitt DJ
SCIENCE 311 (57) 60-63, 2006

MÜLLER,H. – KUTZELNIGG,W. – NOGA,J. A CCSD(T)-R12 study of the ten-electron systems Ne , F^- , HF , H_2O , NH_3 , NH_4^+ and CH_4 . In *Molecular Physics*. Vol.92, no.3 (1997), p.535-546

Citácie z WOS: 4

- 708. Barbieri PL; Fantin PA; Jorge FE
MOLECULAR PHYSICS 104 (18) 2945-2954, 2006
- 709. Benedek NA; Snook IK; Towler MD; Needs RJ
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (10) Art. No. 104302, 2006
- 710. Klopper W; Manby FR; Ten-No S; Valeev EF
INTERNATIONAL REVIEWS IN PHYSICAL CHEMISTRY 25 (3) 427-468, 2006
- 711. Bytautas L; Ruedenberg K
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (17) Art. No. 174304, 2006

NERÁD,I. – ŠAUŠOVÁ,S. – ŠTEVULA,L. The $CaO-Al_2O_3-CaSO_4-H_2O$ system equilibrium states. In *Cement and Concrete Research*. Vol.24, no.2 (1994), p.259-266

Citácie z WOS: 1

- 712. Pourchez J; Valdivieso F; Grosseau P; Guyonnet R; Guilhot B
CEMENT AND CONCRETE RESEARCH 36 (11) 2054-2060, 2006

NERÁD,I. – MIKŠÍKOVÁ,E. – DANĚK,V. Enthalpic analysis of potassium heptafluorotantalate. In *Chemical Papers – Chemické zvesti*. Vol.57, no.2 (2003), p.73-77

Citácie z WOS: 1

713. Kosa L; Mackova I
THERMOCHIMICA ACTA 447 (2) 209-211, 2006

NOGA J. – BARTLETT, R.J. The full CCSDT model for molecular electronic structure. In *Journal of Chemical Physics*. Vol.86, no.12 (1987), p.7041-7050

Citácie z WOS: 21

714. Peterson KA; Shepler BC; Figgen D; Stoll H
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (51) 13877-13883, 2006
715. Sioutis I; Pitzer RM
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (45) 12528-12534, 2006
716. Wang HY; Wang SY; Yamaguchi Y; Schaefer HF
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (16) Art. No. 164317, 2006
717. Karton A; Martin JML
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (14) Art. No. 144313, 2006
718. Song J; Apra E; Khalt YG; Hoffmann MR; Kowalski K
CHEMICAL PHYSICS LETTERS 428 (4-6) 277-282, 2006
719. Hirata S
THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS 116 (1-3) 2-17, 2006
720. Christiansen
THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS 116 (1-3) 106-123, 2006
721. Balabanov NB; Peterson KA
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (7) Art. No. 074110, 2006
722. Bunge CF
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (1) Art. No. 014107, 2006
723. Hinde RJ
FEW-BODY SYSTEMS 38 (2-4) 187-191, 2006
724. Denis PA
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (17) 5887-5892, 2006
725. Ivanov VV; Adamowicz L; Lyakh DI
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (18) Art. No. 184302, 2006
726. Demel O; Pittner J
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (14) Art. No. 144112, 2006
727. Fan PD; Hirata S
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (10) Art. No. 104108, 2006
728. Paterson MJ; Christiansen O; Pawlowski F; Jorgensen P; Hattig C; Helgaker T; Salek P
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (5) Art. No. 054322, 2006
729. Piecuch P; Wloch M; Gour JR; Kinal A
CHEMICAL PHYSICS LETTERS 418 (4-6) 467-474, 2006
730. Wang HY; Wang SY; Yan G; Yamaguchi Y; Schaefer HF
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (4) Art. No. 044309, 2006
731. Wheeler SE; Yamaguchi Y; Schaefer HF
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (4) Art. No. 044322, 2006
732. Kallay M; Gauss J
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM 768 (1-3) 71-77, 2006
733. Bomble YJ; Vazquez J; Kallay M; Michauk C; Szalay PG; Csaszar AG; Gauss J; Stanton JF
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (6) Art. No. 064108, 2006
734. Heckert M; Kallay M; Tew DP; Klopper W; Gauss J
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (4) Art. No. 044108, 2006

NOGA J. – BARTLETT, R.J. – URBAN, M. Towards a full CCSDT model for electron correlation. CCSDT-n models. In *Chemical Physics Letters*. Vol.134, no.2 (1987), p.126-132

Citácie z WOS: 11

735. Fan PD; Piecuch P
ADVANCES IN QUANTUM CHEMISTRY 51 1-57, 2006
736. Chattopadhyay S; Mitra A; Sinha D
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (24) Art. No. 244111, 2006
737. Wang HY; Wang SY; Yamaguchi Y; Schaefer HF
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (16) Art. No. 164317, 2006
738. Kohn A; Olsen J
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (17) Art. No. 174110, 2006
739. Das S; Bera N; Ghosh S; Mukherjee D
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM 771 (1-3) 79-87, 2006
740. Kallay M; Gauss J
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM 768 (1-3) 71-77, 2006
741. Ingels JB; Turney JM; Richardson NA; Yamaguchi Y; Schaefer HF
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (10) Art. No. 104306, 2006

742. Christiansen O
THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS 116 (1-3) 106-123, 2006
 743. Crawford TD
THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS 115 (4) 227-245, 2006
 744. Wang HY; Wang SY; Yan G; Yamaguchi Y; Schaefer HF
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (4) Art. No. 044309, 2006
 745. Paul A; Yamaguchi Y; Schaefer HF; Peterson KA
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (3) Art. No. 034310, 2006
- NOGA,J. – URBAN,M. On expectation calculations of one-electron properties using the coupled cluster wave functions. In *Theoretica Chimica Acta*. Vol.73, no.4 (1988), p.291-306
Citácie z WOS: 2
746. Korona T; Jeziorski B
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (18) Art. No. 184109, 2006
 747. Gauss J; Tajti A; Kallay M; Stanton JF; Szalay PG
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (14) Art. No. 144111, 2006
- NOGA,J. – KUCHARSKI,SA. – BARTLETT,RJ. A coupled-cluster method that includes connected quadruple excitations. In *Journal of Chemical Physics*. Vol.90, no.6 (1989), p.3399-3400
Citácie z WOS: 1
748. Kowalski K
MOLECULAR PHYSICS 104 (13-14) 1989-1997, 2006
- NOGA,J. – VIBÓK,Á. Second-order BSSE-free perturbation theory: intermolecular interactions within supermolecular approach. In *Chemical Physics Letters*. Vol.180, no.1-2 (1991), p.114-120
Citácie z WOS: 1
749. Wang NX; Venkatesh K; Wilson AK
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (2) 779-784, 2006
- NOGA,J. – KUTZELNIGG,W. – KLOPPER,W. CC-R12, a correlation cusp corrected coupled-cluster method with a pilot application to the Be₂ potential curve. In *Chemical Physics Letters*. Vol.199, no.5 (1992), p.497-504
Citácie z WOS: 1
750. Christiansen O
THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS 116 (1-3) 106-123, 2006
- NOGA,J. – KUTZELNIGG,W. Coupled cluster theory that takes care of the correlation cusp by inclusion of linear terms in the interelectronic coordinates. In *Journal of Chemical Physics*. Vol.101, no.9 (1994), p.7738-7762
Citácie z WOS: 6
751. Valeev EF
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (24) Art. No. 244106, 2006
 752. Neiss C; Haettig C; Klopper W
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (6) Art. No. 064111, 2006
 753. Heckert M; Kallay M; Tew DP; Klopper W; Gauss J
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (4) Art. No. 044108, 2006
 754. Klopper W; Manby FR; Ten-No S; Valeev EF
INTERNATIONAL REVIEWS IN PHYSICAL CHEMISTRY 25 (3) 427-468, 2006
 755. Fliegl H; Hattig C; Klopper W
INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY 106 (11) 2306-2317, 2006
 756. Fliegl H; Hattig C; Klopper W
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (4) Art. No. 044112, 2006
- NOGA,J. – TUNEGA,D. – KLOPPER,W. – KUTZELNIGG,W. The performance of the explicitly correlated coupled-cluster method .I. Four-electron systems Be, Li⁻ and LiH. In *Journal of Chemical Physics*. Vol.103, no.1 (1995), p.309-320
Citácie z WOS: 3
757. Pahari D; Ghosh P; Mukherjee D; Chattopadhyay S
THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS 116 (4-5) 621-636, 2006
 758. Harkless JAW; Irikura KK
INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY 106 (11) 2373-2378, 2006
 759. Surjan PR; Toth G
MOLECULAR PHYSICS 104 (13-14) 2037-2046, 2006
- NOGA,J. – KLOPPER,W. – KUTZELNIGG,W. CC-R12: An explicitly correlated coupled-cluster theory. In *Recent Advances in Computational Chemistry*. Vol.3 (1997), p.1-49
Citácie z WOS: 3
760. Bartlett RJ; McClellan J; Greer JC; Monaghan S
JOURNAL OF COMPUTER 13 (1-3) 89-109, 2006

761. Valeev EF
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (24) Art. No. 244106, 2006
 762. Cardoen W; Simons J; Gdanitz RJ
INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY 106 (7) 1516-1527, 2006
- NOGA,J. – VALIRON,P. Explicitly correlated R12 coupled cluster calculations for open shell systems. In *Chemical Physics Letters*. Vol.324, no.1-3 (2000), p.166-174
Citácie z WOS: 4
763. Neiss C; Haettig C; Klopper W
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (6) Art. No. 064111, 2006
 764. Klopper W; Manby FR; Ten-No S; Valeev EF
INTERNATIONAL REVIEWS IN PHYSICAL CHEMISTRY 25 (3) 427-468, 2006
 765. Fliegl H; Hattig C; Klopper W
INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY 106 (11) 2306-2317, 2006
 766. Fliegl H; Hattig C; Klopper W
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (4) Art. No. 044112, 2006
- NOGA,J. – VALIRON,P. – KLOPPER,W. The accuracy of atomization energies from explicitly correlated coupled cluster calculations. In *Journal of Chemical Physics*. Vol.115, no.5 (2001), p.2022-2032
Citácie z WOS: 3
767. Petersson GA; Malick DK; Frisch MJ; Braunstein M
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (4) Art. No. 044107, 2006
 768. Bytautas L; Ruedenberg K
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (17) Art. No. 174304, 2006
 769. Hwang R; Park YC; Lee JS
THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS 115 (1) 54-58, 2006
- NOGA,J. – VALIRON,P. Explicitly correlated coupled cluster R12 calculations. In *Computational Chemistry: Reviews of Current Trends*. Vol.7 (2002), p.131-185
Citácie z WOS: 3
770. Klopper W; Manby FR; Ten-No S; Valeev EF
INTERNATIONAL REVIEWS IN PHYSICAL CHEMISTRY 25 (3) 427-468, 2006
 771. Fliegl H; Hattig C; Klopper W
INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY 106 (11) 2306-2317, 2006
 772. Fliegl H; Hattig C; Klopper W
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (4) Art. No. 044112, 2006
- NOGA,J. In *DIRCCR12 OS DIRECT C* (2003)
Citácie z WOS: 1
773. Benkova Z; Cernusak I; Zahradnik P
MOLECULAR PHYSICS 104 (13-14) 2011-2026, 2006
- NOGA,J. – VALIRON,P. Towards universal R12 consistent basis sets. In *Collection of Czechoslovak Chemical Communications*. Vol.68, no.2 (2003), p.340-356
Citácie z WOS: 1
774. Klopper W; Manby FR; Ten-No S; Valeev EF
INTERNATIONAL REVIEWS IN PHYSICAL CHEMISTRY 25 (3) 427-468, 2006
- NOGA,J. – VALIRON,P. Improved algorithm for triple-excitation contributions within the coupled cluster approach. In *Molecular Physics*. Vol.103, no.15-16 (2005), p.2123-2130, 2005
Citácie z WOS: 1
775. Klopper W; Manby FR; Ten-No S; Valeev EF
INTERNATIONAL REVIEWS IN PHYSICAL CHEMISTRY 25 (3) 427-468, 2006
- PALOU,M. – MAJLING,J. – DRÁBIK,M. – AYADI,A. Ettringite and its chromate analogue, structure and thermal stability. In *Solid State Phenomena*. Vol.90-91 (2003), p.395-400 Citácie z WOS: 1
776. Chrysochoou M; Dermatas D
JOURNAL OF HAZARDOUS MATERIALS 136 (1) 20-33, 2006
- PELIKÁN,P. – NOGA,J. – BISKUPIČ,S. On the structural and electronic properties of poly(dicarbon monofluoride): solid-state semi-empirical INDO study. In *Journal of Solid State Chemistry*. Vol.174, no.2 (2003), p.233-240
Citácie z WOS: 1
777. Lam P; Yazami R
JOURNAL OF POWER SOURCES 153 (2) 354-359, 2006
- PETIT,S. – RIGHI,D. – MADEJOVÁ,J. – DECARREAU,A. Layer charge estimation of smectites using infrared spectroscopy. In *Clay Minerals*. Vol.33, no.4 (1998), p.579-591

Citácie z WOS: 1

778. Czimerova A; Bujdak J; Dohrmann R
APPLIED CLAY SCIENCE 34 (1-4) 2-13, 2006

PETIT,S. – CAILLAUD,J. – RIGHI,D. – MADEJOVÁ,J. – ELSASS,F. – KÖSTER,HM. Characterization and crystal chemistry of an Fe-rich montmorillonite. In *Clay Minerals*. Vol. 37, no.2 (2002), p.283-297

Citácie z WOS: 1

779. Reddy BJ; Frost RL; Weier ML; Martens WN
JOURNAL OF NEAR INFRARED SPECTROSCOPY 14 (4) 241-250, 2006

PRITULA,O. – SMRČOK,I. – BAUMGARTNER,B. On reproducibility of rietveld analysis of reference portland cement clinkers. In *Powder Diffraction*. Vol.18, no.1 (2003), p.16-22

Citácie z WOS: 2

780. De la Torre AG; Cabeza A; Losilla ER; Aranda MAG
ZEITSCHRIFT FÜR KRISTALLOGRAPHIE 587-592, 2006
781. de Noirfontaine MN; Dunstetter F; Courtial M; Gasecki G; Signes-Frehel M
CEMENT AND CONCRETE RESEARCH 36 (1) 54-64, 2006

PRITULA,O. – SMRČOK,I. – TOBBENS,DM. – LANGER,V. X-ray and neutron rietveld quantitative phase analysis of industrial portland cement clinkers. In *Powder Diffraction*. Vol. 19, no.3 (2004), p.232-239

Citácie z WOS: 1

782. Peterson VK; Ray AS; Hunter BA
POWDER DIFFRACTION 21 (1) 12-18, 2006

RAJAMÄKI,T. – NOGA,J. – VALIRON,P. – HALONEN,L. Inversion levels of H₃O⁺ as a probe for the basis set convergence in traditional and explicitly correlated coupled-cluster calculations. In *Molecular Physics*. Vol.102, no.21-22 (2004), p.2259-2268

Citácie z WOS: 1

783. Klopper W; Manby FR; Ten-No S; Valeev EF
INTERNATIONAL REVIEWS IN PHYSICAL CHEMISTRY 25 (3) 427-468, 2006

RAJAN,K. – ŠAJGALÍK,P. Microstructurally induced internal stresses in β-Si₃N₄ whisker reinforced Si₃N₄ ceramics. In *Journal of the European Ceramic Society*. Vol.17, no.9 (1997), p.1093-1097

Citácie zo SCO: 1

784. Xu Y; Cao C; Chen Z; Li J; Wang F; Cai H
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B 110 (7) 3088-3092, 2006

REGE,PD. – MALKINA,OL. – GOROFF,NS. The effect of lewis bases on the ¹³C NMR of lodoalkynes. In *Journal of the American Chemical Society*. Vol.124, no.3 (2002), p.370-371

Citácie z WOS: 3

785. Miller AK; Hughes CC; Kennedy-Smith JJ; Gradl SN; Trauner D
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 128 (51) 17057-17062, 2006
786. Ochiai M
COORDINATION CHEMISTRY REVIEWS 250 (21-22) 2771-2781, 2006
787. Huang QC; Wang ZM; Chu QL; Zhu SZ
JOURNAL OF INCLUSION PHENOMENA AND MACROCYCLIC CHEMISTRY 54 (3-4) 177-180, 2006

RODE,BM. – SON,HL. – SUWANNACHOT,Y. – BUJDÁK,J. The combination of salt induced peptide formation reaction and clay catalysis: A way to higher peptides under primitive earth conditions. In *Origins of Life and Evolution of the Biosphere*. Vol.29, no.3 (1999), p.273-286

Citácie z WOS: 2

788. Schmidt P
ORIGINS OF LIFE AND EVOLUTION OF THE BIOSPHERE 36 (4) 391-411, 2006
789. Pascal R; Boiteau L; Forterre P; Gargaud M; Lazcano A; Lopez-Garcia P; Moreira D; Maurel MC; Pereto J; Prieur D; Reisse J
EARTH MOON AND PLANETS 98 (1-4) 153-203, 2006

Iné citácie: 1

790. Adams JM; McCabe RW
CLAY MINERALS AS CATALYSTS-HANDBOOK OF CLAY SCIENCE, 2006

SAHU,S. – KAVECKÝ,Š. – ILLÉSOVÁ,I. – MADEJOVÁ,J. – BERTÓTI,I. – SZÉPVÖLGYI,J. Formation of boron nitride thin films on β-Si₃N₄ whiskers and α-SiC platelets by dip-coating. In *Journal of the European Ceramic Society*. Vol.18, no.8 (1998), p. 1037-1043

Citácie z WOS: 1

791. Wei ZP; Yao B; Zhang ZZ; Lu YM; Shen DZ; Li BH; Wang XH; Zhang JY; Zhao DX; Fan XW
APPLIED PHYSICS LETTERS 89 (10) Art. No. 102104, 2006

SHENDEROVICH,IG. – SMIRNOV,SN. – DENISOV,GS. – GINDIN,VA. – GOLUBEV,NS. – DUNGER,A. – REIBKE,R. – KIRPEKAR,S. – MALKINA,OL. – LIMBACH,HH. Nuclear magnetic resonance of hydrogen bonded clusters between F- and (HF)_n: Experiment and theory. In *Berichte der Bunsen-Gesellschaft Physical Chemistry Chemical Physics*. Vol.102, no.3 (1998), p.422-428

Citácie z WOS: 5

792. Cybulski H; Pecul M; Sadlej J
CHEMICAL PHYSICS 326 (2-3) 431-444, 2006
793. Weinhold F
PEPTIDE SOLVATION AND H-BONDS ADVANCES IN PROTEIN CHEMISTRY 72-121, 2006
794. Cybulski H; Tyminska E; Sadlej J
CHEMPHYSICHEM 7 (3) 629-639, 2006
795. Salanne M; Simon C; Turq P
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B 110 (8) 3504-3510, 2006
796. Afonin AV; Ushakov IA; Sobenina LN; Stepanova ZV; Petrova OV; Trofimov BA
MAGNETIC RESONANCE IN CHEMISTRY 44 (1) 59-65, 2006

SCHLEYER,PV. – JIAO,HJ. – HOMMES,NJRV. – MALKIN,VG. – MALKINA,OL. An evaluation of the aromaticity of inorganic rings: Refined evidence from magnetic properties. In *Journal of the American Chemical Society*. Vol.119, 51 (1997), p.12669-12670

Citácie z WOS: 31

797. Nigam S; Majumder C; Kulshreshtha SK
JOURNAL OF CHEMICAL SCIENCES 118 (6) 575-578, 2006
798. Li ZW; Zhao CY; Chen LP
PROGRESS IN CHEMISTRY 18 (12) 1599-1607, 2006
799. Duan HX; Li QS
CHEMICAL PHYSICS LETTERS 432 (1-3) 331-335, 2006
800. Roy DR; Subramanian V; Chattaraj PK
INDIAN JOURNAL OF CHEMISTRY SECTION A 45 (11) 2369-2380, 2006
801. Huertas O; Poater J; Fuentes-Cabrera M; Orozco M; Sola M; Luque FJ
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (44) 12249-12258, 2006
802. Deleuze MS
CHEMICAL PHYSICS 329 (1-3) 22-38, 2006
803. Bakk I; Bona A; Nyulaszi L; Szieberth D
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM 770 (1-3) 111-118, 2006
804. Cheng LP; Li XQ
JOURNAL OF MOLECULAR MODELING 12 (6) 805-811, 2006
805. Xiu HZ; Se L; Qian SL
JOURNAL OF THEORETICAL AND COMPUTATIONAL CHEMISTRY 5 475-487, 2006
806. Jaska CA; Emslie DJH; Bosdet MJD; Piers WE; Sorensen TS; Parvez M
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 128 (33) 10885-10896, 2006
807. Del Bene JE; Elguero J; Alkorta I; Yanez M; Mo O
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (32) 9959-9966, 2006
808. Hajgato B; Deleuze MS; Ohno K
CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL 12 (22) 5757-5769, 2006
809. Liu ZZ; Tian WQ; Feng JK; Zhang G; Li WQ; Cui YH; Sun CC
EUROPEAN JOURNAL OF INORGANIC CHEMISTRY (14) 2808-2818, 2006
810. Ajami D; Hess K; Kohler F; Nather C; Oeckler O; Simon A; Yamamoto C; Okamoto Y; Herges R
CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL 12 (21) 5434-5445, 2006
811. Bansal RK; Gupta N; Kumawat SK; Gupta R
HETEROATOM CHEMISTRY 17 (5) 402-410, 2006
812. Makedonas C; Mitsopoulou CA
EUROPEAN JOURNAL OF INORGANIC CHEMISTRY (12) 2460-2468, 2006
813. Driess M; Yao SL; Brym M; van Wullen C
ANGEWANDTE CHEMIE 45 (26) 4349-4352, 2006
814. Wang H; Wu HS; Jia JF
CHINESE JOURNAL OF CHEMISTRY 24 (6) 731-738, 2006
815. Wang FF; Li ZR; Wu D; Sun XY; Chen W; Li Y; Sun CC
CHEMPHYSICHEM 7 (5) 1136-1141, 2006
816. Li ZR; Wang FF; Wu D; Li Y; Chen W; Sun XY; Gu FL; Aoki Y
JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY 27 (8) 986-993, 2006
817. Hong B; Chang YF; Qiu YQ; Sun H; Su ZM; Wang RS
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (14) Art. No. 144108, 2006
818. Hofmann M; Berndt A
HETEROATOM CHEMISTRY 17 (3) 224-237, 2006
819. Xu XF; Shang ZF; Li RF; Cai ZS; Zhao XZ
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM 760 (1-3) 99-107, 2006

820. Wright LJ
DALTON TRANSACTIONS (15) 1821-1827, 2006
821. Xu WG; Jin B
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM 759 (1-3) 101-107, 2006
822. Zhang Q; Lu X; Huang RB; Zheng LS
INORGANIC CHEMISTRY 45 (6) 2457-2460, 2006
823. Liu ZZ; Tian WQ; Feng JK; Zhang G; Li WQ
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM 758 (2-3) 127-138, 2006
824. Xu WG; Jin B
CHEMICAL PHYSICS LETTERS 419 (4-6) 439-443, 2006
825. Bansal RK; Gupta N; Kumawat SK
TETRAHEDRON 62 (7) 1548-1556, 2006
826. Takahashi M; Kawazoe Y
CHEMICAL PHYSICS LETTERS 418 (4-6) 475-480, 2006
827. Cheng LP; Liu Y
CHEMICAL PHYSICS LETTERS 418 (1-3) 272-280, 2006

SCHOLTZOVÁ, E. – TUNEGA, D. – TURI NAGY, L. Theoretical study of cation substitution in trioctahedral sheet of phyllosilicates. An effect on inner OH group. In *Journal of Molecular Structure – Theochem.* Vol.620, no.1 (2003), p.1-8

Citácie z WOS: 2

828. Boulet P; Greenwell HC; Stackhouse S; Coveney PV
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM 762 (1-3) 33-48, 2006
829. Nkoubou C; Njopwouo D; Villieras F; Njoya A; Ngoune CY; Ndjock LN; Tchoua FM; Yvon J
JOURNAL OF AFRICAN EARTH SCIENCES 45 (1) 61-73, 2006

SCHWEIFER, J. – WEINBERGER, P. – MERETTER, K. – BOČA, M. – REICHL, C. – WIESINGER, G. – HILSCHER, G. – VAN KONINGSBRUGGEN, P. J. – KOIJINAN, H. – GRUNERT, M. – LINERT, W. Catena-[μ -Tris(1,2-bis(tetrazol-1-yl)ethane-N₄,N₄'iron(II)) bis(tetrafluoroborate): synthesis, structure, spectroscopic and magnetic characterization of a chain-type coordination polymer spin-crossover compound. In *Inorganica Chimica Acta.* Vol. 339 (2002), p.297-306

Citácie z WOS: 4

830. Galet A; Gaspar AB; Munoz MC; Levchenko G; Real JA
INORGANIC CHEMISTRY 45 (24) 9670-9679, 2006
831. Genre C; Matouzenko GS; Jeanneau E; Luneau D
NEW JOURNAL OF CHEMISTRY 30 (11) 1669-1674, 2006
832. Gaponik PN; Voitekhovich SV; Ivashkevich OA
USPEKHI KHIMII 75 (6) 569-603, 2006
833. Boland Y; Hertsens P; Marchand-Brynaert J; Garcia Y
SYNTHESIS (9) 1504-1512, 2006

SCHWENDT, P. – ŠVANČÁREK, P. – KUČTA, L. – MAREK, J. A new coordination mode for the tartrato ligand. Synthesis of vanadium(V) oxo peroxo tartrato complexes and the X-ray crystal of K₂[{VO(O₂) (L-tartH₂)₂(μ -H₂O)].5H₂O. In *Polyhedron.* Vol.17, no.13-14 (1998), p. 2161-2166

Citácie z WOS: 2

834. Li DS; Zhou CH; Wang YY; Fu F; Wu YP; Qi GC; Shi QZ
CHINESE JOURNAL OF CHEMISTRY 24 (10) 1352-1358, 2006
835. Au-Yeung ASF; Sung HHY; Cha JAK; Siu AWH; Chui SSY; Williams ID
INORGANIC CHEMISTRY COMMUNICATIONS 9 (5) 507-511, 2006

SMATANOVÁ, I. K. – MAREK, J. – ŠVANČÁREK, P. – SCHWENDT, P. Bis(tetra-n-butylammonium)bis[(mandelato)oxo(peroxo)vanadate(V)] mandelic acid solvate. In *Acta Crystallographica C.* Vol.56 (2000), p.154-155

Citácie z WOS: 2

836. Beghidja A; Rabu P; Rogez G; Welter R
CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL 12 (29) 7627-7638, 2006
837. Beghidja A; Rogez G; Rabu P; Welter R; Drillon M
JOURNAL OF MATERIALS CHEMISTRY 16 (26) 2715-2728, 2006

SMRČOK, I. – WEISS, Z. DIFK91 – program for modeling of powder diffraction patterns on a PC. In *Journal of Applied Crystallography.* Vol.26 (1993), p.140-141

Citácie z WOS: 1

838. Perez-Rodriguez JL; Wiewiora A; Drapala J; Perez-Maqueda LA
ULTRASONICS SONOCHEMISTRY 13 (1) 61-67, 2006

SMRČOK, I. – ĐUROVIČ, S. – PETRIČEK, V. – WEISS, Z. Refinement of the crystal structure of cronstedtite-3T. In *Clays and Clay Minerals.* Vol.42, no.5 (1994), p.544-551

Citácie z WOS: 1

839. Hybler J
EUROPEAN JOURNAL OF MINERALOGY 18 (2) 197-205, 2006
- SMRČOK, L. – KOPPELHUBER-BITSCHNAU, B. – SHANKLAND, K. – DAVID, WIF. – TUNEGA, D. – RESEL, R.
Decafluoroquaterphenyl - crystal and molecular structure solved from X-ray powder data. In *Zeitschrift für Kristallographie*.
Vol.216, no.1 (2001), p.63-66
Citácie z WOS: 1
840. Altomare A; Cuocci C; Giacobazzo C; Moliterni AGG; Rizzi R
JOURNAL OF APPLIED CRYSTALLOGRAPHY 39 145-150, 2006
- SMRČOK, L. – TUNEGA, D. – LANGER, V. – KOÓŠ, M. Intramolecular hydrogen bond and proton transfer in 3-(2-benzimidazolylthio)-2,4-pentanedione. Crystallographic evidence and theoretical calculations. In *Zeitschrift für Kristallographie*. Vol.217, no.5 (2002), p.217-222
Citácie z WOS: 1
841. Zhang XF; Chen H; Ma CB; Chen CN; Liu QT
DALTON TRANSACTIONS (33) 4047-4055, 2006
- STUCKI, JW. – KOMADEL, P. – WILKINSON, HT. Microbial reduction of structural iron(III) in smectites. In *Soil Science Society of America Journal*. Vol.51, no.6 (1987), p.1663-1665
Citácie z WOS: 4
842. O'Reilly SE; Furukawa Y; Newell S
CHEMICAL GEOLOGY 235 (1-2) 1-11, 2006
843. McLean JE; Dupont RR; Sorensen DL
JOURNAL OF ENVIRONMENTAL QUALITY 35 (4) 1193-1203, 2006
844. Berthelin J; Ona-Nguema G; Stemmler S; Quantin C; Abdelmoula M; Jorand F
COMPTES RENDUS GEOSCIENCE 338 (6-7) 447-455, 2006
845. Seabaugh JL; Dong HL; Kukkadapu RK; Eberl DD; Morton JP; Kim J
CLAYS AND CLAY MINERALS 54 (1) 67-79, 2006
- STUCKI, JW. – WU, J. – GAN, HM. – KOMADEL, P. – BANIN, A. Effects of iron oxidation state and organic cations on dioctahedral smectite hydration. In *Clays and Clay Minerals*. Vol.48, no.2 (2000), p.290-298
Citácie z WOS: 1
846. Ozcan A; Oncu EM; Ozcan AS
JOURNAL OF HAZARDOUS MATERIALS 129 (1-3) 244-252, 2006
- SVRČEK, M. – BAŇACKÝ, P. – BISKUPIČ, S. – NOGA, J. – PELIKÁN, P. – ZAJAC, A. Adiabatic correction to the energy of molecular systems: The CPHF equivalent of the Born-Handy formula. In *Chemical Physics Letters*. Vol.299, no.2 (1999), p.151-157
Citácie z WOS: 1
847. Gauss J; Tajti A; Kallay M; Stanton JF; Szalay PG
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (14) Art. No. 144111, 2006
- ŠAJGALÍK, P. α/β phase transformation of silicon nitride without sintering additives. In *Journal of the European Ceramic Society*. Vol.8 (1991), p.21-27
Citácie z WOS: 1
848. Lehner W; Kleebe HJ; Ziegler G
JOURNAL OF THE EUROPEAN CERAMIC SOCIETY 26 (1-2) 201-208, 2006
- ŠAJGALÍK, P. – GALUSEK, D. α/β phase transformation of silicon nitride - homo and heterogenous nucleation. In *Journal of Materials Science Letters*. Vol.12 (1993), p.1937-1939
Citácie z WOS: 1
849. Lehner W; Kleebe HJ; Ziegler G
JOURNAL OF THE EUROPEAN CERAMIC SOCIETY 26 (1-2) 201-208, 2006
- ŠAJGALÍK, P. – DUSZA, J. – HOFFMANN, MJ. Microstructural design of reinforced Si₃N₄ ceramics with respect to the toughening mechanisms. In *Ceramica Acta*. Vol.5 (1994), p.35-41
Citácie z WOS: 1
850. Vuckovic A; Boskovic S; Matovic B; Vlajic M; Krstic V
CERAMICS INTERNATIONAL 32 (3) 303-307, 2006
- ŠAJGALÍK, P. – DUSZA, J. – HOFFMANN, MJ. Relationship between microstructure, toughening mechanisms and fracture toughness of reinforced silicon nitride ceramics. In *Journal of the American Ceramic Society*. Vol.78, no.10 (1995), p.2619-2624
Citácie z WOS: 3
851. Matovic B; Rixecker G; Boskovic S; Aldinger F
INTERNATIONAL JOURNAL OF MATERIALS RESEARCH 97 (9) 1268-1272, 2006

852. Luo JT; Zhang KF; Wang GF; Han WB
JOURNAL OF WUHAN UNIVERSITY OF TECHNOLOGY 21 (3) 97-99, 2006
853. Kim YG; Tatami J; Komeya K; Kim DK
THIN SOLID FILMS 510 (1-2) 222-228, 2006
- Citácie zo SCO: 1
854. Kalantar M; Fantozzi G
IRANIAN JOURNAL OF SCIENCE AND TECHNOLOGY TRANSACTION B 30 (3) 387-400, 2006
- ŠAJGALÍK,P. – LENČEŠ,Z. – DUSZA,J. Composites with enhanced room temperature properties. In *Journal of Materials Science*. Vol.31 (1996), p.4837-4842
- Iné citácie: 1
855. Sciti D; Nagliati M; Silvestroni L; Guicciardi S; Pezzotti G
CERAMIC ENGINEERING AND SCIENCE PROCEEDINGS 27 (2) 257-264, 2006
- ŠAJGALÍK,P. – RAJAN,K. – WARBICHLER,P. – HOFFER,F. – DUSZA,J. Silicon nitride based nano- and micro-composites with enhanced mechanical properties. In *Key Engineering Materials*. Vol.159-160 (1999), p.405-410
- Citácie z WOS: 1
856. Zou B; Huang CZ; Wang J; Liu BQ
KEY ENGINEERING MATERIALS 315-316 154-158, 2006
- ŠAJGALÍK,P. – HNATKO,M. – LOFAJ,F. – HVIZDOŠ,P. – DUSZA,J. – WARBICHLER,P. – HOFER,F. – RIEDEL,R. – LECOMTE,E. – HOFFMANN,MJ. SiC/Si₃N₄ nano/micro-composites - processing, RT and HT mechanical properties. In *Journal of the European Ceramic Society*. Vol.20, no.4 (2000), p.453-462
- Citácie zo SCO: 1
857. Hiratsuka D; Tatami J; Meguro T; Komeya K; Hayashi I; Yang JF; Omori M
KEY ENGINEERING MATERIALS 317-318 633-636, 2006
- ŠIMURKA,P. – LIŠKA,M. – ANTALÍK,J. Liquidus temperature and structure of the glass melts in the 15Na₂O.10(MgO,CaO,TiO₂,ZrO₂).75SiO₂ system. In *Ceramics-Silikáty*. Vol.39, no.1 (1995), p.9-13
- Citácie z WOS: 1
858. Karell R; Kraxner J; Chromcikova M
CERAMICS-SILIKATY 50 (2) 78-82, 2006
- ŠTEVULA,L. – MADEJ,J. – KOZÁNKOVÁ,J. – MADEJOVÁ,J. Hydration products at the blastfurnace slag aggregate – cement paste interface. In *Cement and Concrete Research*. Vol. 24, no.3 (1994), p.413-423
- Citácie z WOS: 1
859. Chang CF; Chen JW
CEMENT AND CONCRETE RESEARCH 36 (9) 1760-1767, 2006
- ŠUCHA,V. – KRAUS,I. – MADEJOVÁ,J. Ammonium illite from anchimetamorphic shales associated with anthracite in the zemplinicum of the western carpathians. In *Clay Minerals*. Vol.29, no.3 (1994), p.369-377
- Citácie z WOS: 1
860. Ader M; Cartigny P; Boudou JP; Oh JH; Petit E; Javoy M
CHEMICAL GEOLOGY 232 (3-4) 152-169, 2006
- Iné citácie: 1
861. Bergaya F; Lagaly G
GENERAL INTRODUCTION: CLAYS,CLAY MINERALS AND CLAY SCIENCE-HANDBOOK OF CLAY SCIENCE, 2006
- ŠUCHA,V. – ELSASS,F. – EBERL,DD. – KUČHTA,L. – MADEJOVÁ,J. – GATES,WP. – KOMADEL,P. Hydrothermal synthesis of ammonium illite. In *American Mineralogist*. Vol. 83, no.1-2 (1998), p.58-67
- Citácie z WOS: 1
862. Srodon J; Clauer N; Banas M; Wojtowicz A
CLAY MINERALS 41 (2) 669-690, 2006
- Iné citácie: 2
863. Srodon J
IDENTIFICATION AND QUANTITATIVE ANALYSIS OF CLAY MINERALS-HANDBOOK OF CLAY SCIENCE, 2006
864. Petit S
FOURIER TRANSFORM INFRARED SPECTROSCOPY-HANDBOOK OF CLAY SCIENCE, 2006
- ŠUCHA,V. – ŠRODOŇ,J. – CLAUER,N. – ELSASS,F. – EBERL,DD. – KRAUS,I. – MADEJOVÁ,J. Weathering of smectite and illite-smectite under temperate climatic conditions. In *Clay Minerals*. Vol.36, no.3 (2001), p.403-419
- Citácie z WOS: 2
865. Frempong EM; Yanful EK
BULLETIN OF ENGINEERING GEOLOGY AND THE ENVIRONMENT 65 (3) 253-271, 2006

866. Jozefaciuk G; Matyka-Sarzynska D
CLAYS AND CLAY MINERALS 54 (2) 220-229, 2006
- TKÁČ,I. – KOMADEL,P. – MÜLLER,D. The ^{27}Al and ^{29}Si MAS-NMR study of acid leaching of montmorillonite. In *Proceedings 11th Conference Clay Mineralogy and Petrology*. (1993), p. 273-279
Iné citácie: 1
867. Stucki JW
PROPERTIES AND BEHAVIOR OF IRON IN CLAY MINERALS-HANDBOOK OF CLAY SCIENCE, 2006
- TKÁČ,I. – KOMADEL,P. – MÜLLER,D. Acid-treated montmorillonites – a study by ^{29}Si and ^{27}Al MAS NMR. In *Clay Minerals*. Vol.29, no.1 (1994), p.11-19
Citácie z WOS: 4
868. Grandjean J
CLAY MINERALS 41 (2) 567-586, 2006
869. Yang T; Wen XD; Li JF; Yang LM
APPLIED SURFACE SCIENCE 252 (18) 6154-6161, 2006
870. Valentin JL; Lopez-Manchado MA; Posadas P; Rodriguez A; Marcos-Fernandez AM; Ibarra L
JOURNAL OF COLLOID AND INTERFACE SCIENCE 298 (2) 794-804, 2006
871. Temuujin J; Senna M; Jadambaa T; Burmaa D; Erdenechimeg S; MacKenzie KJ
JOURNAL OF CHEMICAL TECHNOLOGY AND BIOTECHNOLOGY 81 (4) 688-693, 2006
- TRUCKS,GW. – NOGA,J. – BARTLETT,RJ. Convergence of the coupled cluster singles, doubles and triples method. In *Chemical Physics Letters*. Vol.145, no.6 (1988), p.548-554
Citácie z WOS: 1
872. Fan PD; Piecuch P
ADVANCES IN QUANTUM CHEMISTRY 51 1-57, 2006
- TUNEGA,D. – TURI NAGY,L. Calculation of electron-structure of talc by semiempirical methods of quantum-chemistry. In *Ceramics-Silikáty*. Vol.37, no.3 (1993), p.145-147
Citácie z WOS: 1
873. Bruno M; Prencipe M; Valdre' G
PHYSICS AND CHEMISTRY OF MINERALS 33 (1) 63-71, 2006
- TUNEGA,D. – TURI NAGY,L. – VARGA,Š. Semiempirical quantum-chemical calculation of electrostatic potential generated by idealized layer of talc. In *Chemical Papers – Chemické zvesti*. Vol.47, no.5 (1993), p.273-278
Citácie z WOS: 1
874. Bruno M; Prencipe M; Valdre' G
PHYSICS AND CHEMISTRY OF MINERALS 33 (1) 63-71, 2006
- TUNEGA,D. – NOGA,J. Static electric properties of LiH: explicitly correlated coupled cluster calculations. In *Theoretical Chemistry Accounts*. Vol.100, no.1-4 (1998), p.78-84
Citácie z WOS: 2
875. Magnasco V; Battezzati M; Rapallo A; Costa C
CHEMICAL PHYSICS LETTERS 428 (4-6) 231-235, 2006
876. Pernal K; Baerends EJ
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (1) Art. No. 014102, 2006
- TUNEGA,D. – HABERHAUER,G. – GERZABEK,M. – LISCHKA,H. Interaction of acetate anion with hydrated Al^{3+} cation: A theoretical study. In *Journal of Physical Chemistry A*. Vol. 104, no.29 (2000), p.6824-6833
Citácie z WOS: 2
877. Mazzuca D; Russo N; Toscano M; Grand A
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B 110 (17) 8815-8824, 2006
878. Rezabal E; Mercero JM; Lopez X; Ugalde JM
JOURNAL OF INORGANIC BIOCHEMISTRY 100 (3) 374-384, 2006
- TUNEGA,D. – BENCO,I. – HABERHAUER,G. – GERZABEK,MH. – LISCHKA,H. Ab initio molecular dynamics study of adsorption sites on the (001) surfaces of 1 : 1 dioctahedral clay minerals. In *Journal of Physical Chemistry B*. Vol.106, no.44 (2002), p.11515-11525
Citácie z WOS: 3
879. Boulet P; Greenwell HC; Stackhouse S; Coveney PV
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM 762 (1-3) 33-48, 2006
880. Schaumann GE
JOURNAL OF PLANT NUTRITION AND SOIL SCIENCE 169 (2) 145-156, 2006
881. Greenwell HC; Jones W; Coveney PV; Stackhouse S
JOURNAL OF MATERIALS CHEMISTRY 16 (8) 708-723, 2006

TUNEGA,D. – HABERHAUER,G. – GERZABEK,MH. – LISCHKA,H. Theoretical study of adsorption sites on the (001) surfaces of 1 : 1 clay minerals. In *Langmuir*. Vol.18, no.1 (2002), p.139-147

Citácie z WOS: 3

- 882. Sutton R; Sposito G
GEOCHIMICA ET COSMOCHIMICA ACTA 70 (14) 3566-3581, 2006
- 883. Boulet P; Greenwell HC; Stackhouse S; Coveney PV
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM 762 (1-3) 33-48, 2006
- 884. Wang JW; Kalinichev AG; Kirkpatrick RJ
GEOCHIMICA ET COSMOCHIMICA ACTA 70 (3) 562-582, 2006

TUNEGA,D. – GERZABEK,MH. – LISCHKA,H. Ab initio molecular dynamics study of a monomolecular water layer on octahedral and tetrahedral kaolinite surfaces. In *Journal of Physical Chemistry B*. Vol.108, no.19 (2004), p.5930-5936

Citácie z WOS: 3

- 885. Harris RG; Johnson BB; Wells JD
CLAYS AND CLAY MINERALS 54 (4) 435-448, 2006
- 886. Harris RG; Wells JD; Angove MJ; Johnson BB
CLAYS AND CLAY MINERALS 54 (4) 456-465, 2006
- 887. Wang JW; Kalinichev AG; Kirkpatrick RJ
GEOCHIMICA ET COSMOCHIMICA ACTA 70 (3) 562-582, 2006

TURI NAGY,L. – TUNEGA,D. – LIŠKA,M. Modeling of interaction properties of surfaces of phyllosilicates: A theoretical forecast of adsorption isotherms of noble gases at the talc surface. In *International Journal of Quantum Chemistry*. Vol.57, no.5 (1996), p.843-849

Citácie z WOS: 1

- 888. Bruno M; Prencipe M; Valdre' G
PHYSICS AND CHEMISTRY OF MINERALS 33 (1) 63-71, 2006

TURI NAGY,L. – MICOV,M. – BENCO,I. – LIŠKA,M. – MACH,P. – TUNEGA,D. Electronic structure of alumina surface. In *International Journal of Quantum Chemistry*. Vol. 70, no.2 (1998), p.341-350

Citácie z WOS: 1

- 889. Yang R; Rendell AP
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B 110 (19) 9608-9618, 2006

URBAN,M. – NOGA,J. – COLE,SJ. – BARTLETT,RJ. Towards a full CCSDT model for electron correlation. In *Journal of Chemical Physics*. Vol.83, no.8 (1985), p.4041-4046

Citácie z WOS: 27

- 890. Fan PD; Piecuch P
ADVANCES IN QUANTUM CHEMISTRY 51 1-57, 2006
- 891. Chattopadhyay S; Mitra A, Sinha D
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (24) Art. No. 244111, 2006
- 892. Kowalski K; Valiev M
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (48) 13106-13111, 2006
- 893. Reisenauer HP; Romanski J; Mloston G; Schreiner PR
EUROPEAN JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY (21) 4813-4818, 2006
- 894. De Mare GR; Panchenko YN
JOURNAL OF STRUCTURAL CHEMISTRY 47 (2) 232-240, 2006
- 895. Li XZ; Paldus J
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (16) Art. No. 164107, 2006
- 896. Das S; Bera N; Ghosh S; Mukherjee D
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM 771 (1-3) 79-87, 2006
- 897. Kowalski K de Jong WA
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM 768 (1-3) 45-52, 2006
- 898. Meissner L
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM 768 (1-3) 63-69, 2006
- 899. Kallay M; Gauss J
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM 768 (1-3) 71-77, 2006
- 900. Song J; Apra E; Khalt YG; Hoffmann MR; Kowalski K
CHEMICAL PHYSICS LETTERS 428 (4-6) 277-282, 2006
- 901. Yurchenko SN; Carvajal M; Thiel W; Jensen P
JOURNAL OF MOLECULAR SPECTROSCOPY 239 (1) 71-87, 2006
- 902. Pahari D; Ghosh P; Mukherjee D; Chattopadhyay S
THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS 116 (4-5) 621-636, 2006
- 903. Hirata S
THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS 116 (1-3) 2-17, 2006
- 904. Christiansen O
THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS 116 (1-3) 106-123, 2006

905. Schreiner PR; Fokin AA; Pascal RA; de Meijere A
ORGANIC LETTERS 8 (17) 3635-3638, 2006
906. Kowalski K
MOLECULAR PHYSICS 104 (13-14) 1989-1997, 2006
907. Li XZ; Paldus J
MOLECULAR PHYSICS 104 (13-14) 2047-2062, 2006
908. Loch MW; Lodriguito MD; Piecuch P; Gour JR
MOLECULAR PHYSICS 104 (13-14) 2149-2172, 2006
909. Unterreiner BV; Carissan Y; Klopper W
CHEMPHYSCHEM 7 (6) 1311-1321, 2006
910. Demel O; Pittner J
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (14) Art. No. 144112, 2006
911. Schreiner PR; Reisenauer HP
CHEMPHYSCHEM 7 (4) 880-885, 2006
912. Braga AAC; Morgon NH
QUIMICA NOVA 29 (2) 187-193, 2006
913. Jakubek ZJ; Bunker PR; Zachwieja M; Nakhate SG; Simard B; Yurchenko SN; Thiel W; Jensen P
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (9) Art. No. 094306, 2006
914. Piecuch P; Wloch M; Gour JR; Kinal A
CHEMICAL PHYSICS LETTERS 418 (4-6) 467-474, 2006
915. Li XZ; Paldus J
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (3) Art. No. 034112, 2006
916. Piecuch P; Hirata S; Kowalski K; Fan PD; Windus TL
INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY 106 (1) 79-97, 2006

VAARA,J. – MALKINA,OL. – STOLL,H. – MALKIN,VG. – KAUPP,M. Study of relativistic effects on nuclear shieldings using density-functional theory and spin-orbit pseudopotentials. In *Journal of Chemical Physics*. Vol.114, no.1 (2001), p.61-71

Citácie z WOS: 5

917. Demko BA; Eichele K; Wasylishen RE
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (50) 13537-13550, 2006
918. Ootani Y; Yamaguti H; Maeda H; Fukui H
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (16) Art. No. 164106, 2006
919. Kudo K; Maeda H; Kawakubo T; Ootani Y; Funaki M; Fukui H
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (22) Art. No. 224106, 2006
920. Corminboeuf C
CHEMICAL PHYSICS LETTERS 418 (4-6) 437-441, 2006
921. Corminboeuf C; Wannere CS; Roy D; King RB; Schleyer PV
INORGANIC CHEMISTRY 45 (1) 214-219, 2006

VALIRON,P. – KEDŽUCH,S. – NOGA,J. Avoiding numerical instabilities in R12 calculations through universal R12 consistent basis sets. In *Chemical Physics Letters*. Vol. 367, no.5-6 (2003), p.723-729

Citácie z WOS: 1

922. Klopper W; Manby FR; Ten-No S; Valeev EF
INTERNATIONAL REVIEWS IN PHYSICAL CHEMISTRY 25 (3) 427-468, 2006

VARGA,Š. Density fitting of coulomb integrals in electronic structure calculations of solids. In *Physical Review B*. Vol.71 (2005), p.073103-1-073103-3

Citácie z WOS: 1

923. Zope RR; Dunlap BI
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 044107, 2006

VARGA,Š. – MILKO,M. – NOGA,J. Density fitting of two-electron integrals in extended systems with translational periodicity: The coulomb problem. In *Journal of Chemical Physics*. Vol.124, no.3 (2006), p.034106-1-034106-7

Citácie z WOS: 1

924. Witek HA; Irle S; Zheng GS; de Jong WA; Morokuma K
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125 (21) Art. No. 214706, 2006

WATTS,JD. – ČERNUŠÁK,I. – NOGA,J. – BARTLETT,RJ. – BAUSCHLICHER,CW. – LEE,TJ. – RENDELL,AP. – TAYLOR,PR. Triple and quadruple excitation to the binding in Be clusters: Calibration calculations on Be₃. In *Journal of Chemical Physics*. Vol.93, no.12 (1990), p.8875-8880

Citácie z WOS: 1

925. Piecuch P; Hirata S; Kowalski K; Fan PD; Windus TL
INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY 106 (1) 79-97, 2006

YAU,BS. – HUANG,JL. – LI,DF. – ŠAJGALÍK,P. Investigation of nanocrystal-(Ti,Al)N_x/amorphous-SiN_y composite films by co-deposition process. In *Surface and Coatings Technology*. Vol.177 (2004), p.209-214

Citácie z WOS: 1

926. Chang YY; Yang SJ; Wang DY
SURFACE AND COATINGS TECHNOLOGY 201 (7) 4209-4214, 2006

ZAHN,G. – GROßMANN,G. – SCHELLER,D. – MALKINA,OL. Polymorphie von bis(dineopentoxophosphorothioyl)diselenid - Korrelation of roentgenstruktur and MAAS NMR daten. In *Zeitschrift für Anorganische und Allgemeine Chemie*. Vol.626, no.2 (2000), p.524-528

Citácie z WOS: 1

927. Harris RK
ANALYST 131 (3) 351-373, 2006

ZAJAC,A. – PELIKÁN,P. – MINÁR,J. – NOGA,J. – STRAKA,M. – BAŇACKÝ,P. – BISKUPIČ,S. The structure and properties of graphite monofluoride by using the three-dimensional cyclic cluster approach. In *Journal of Solid State Chemistry*. Vol.150, no.2 (2000), p.286-293

Citácie z WOS: 2

928. Dubois M; Giraudet J; Guerin K; Hamwi A; Fawal Z; Pirotte P; Masin F
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B 110 (24) 11800-11808, 2006
929. Lam P; Yazami R
JOURNAL OF POWER SOURCES 153 (2) 354-359, 2006

ZEMANOVÁ,M. – LECOMTE,E. – ŠAJGALÍK,P. – RIEDEL,R. Polysilazane derived micro/nano Si₃N₄/SiC composites. In *Journal of the European Ceramic Society*. Vol.22, no.16 (2002), p.2963-2968

Citácie z WOS: 2

930. Lim TW; Park SH; Yang DY; Pham TA; Lee DH; Kim DP; Chang SI; Yoon JB
MICROELECTRONIC ENGINEERING 83 (11-12) 2475-2481, 2006
931. Pham TA; Kim DP; Lim TW; Park SH; Yang DY; Lee KS
ADVANCED FUNCTIONAL MATERIALS 16 (9) 1235-1241, 2006

ZHANG,B. – ZHUANG,H. – ŠAJGALÍK,P. Laminate-structure ceramic composites. In *Journal of Inorganic Materials*. Vol.12, no.6 (1997), p.769-773.

Citácie zo SCO: 1

932. Li L; Ning H; Liu Z; She Y; Liu D; Fu J;
JOURNAL OF ROCK MECHANICS AND ENGINEERING 25 2 3933-3938, 2006

ŽÚRKOVÁ,E. – KUCSERA,R. – DRÁBIK,M. Synthesis and properties of 1,4-butanediammonium polyvanadates. In *Chemical Papers – Chemické zvesti.* Vol. 54, no.4 (2000), p.203-209

Citácie z WOS: 2

933. Rakovsky E; Gyepes R
ACTA CRYSTALLOGRAPHICA E 62 2108-2110, 2006
934. Rakovsky E; Gyepes R
ACTA CRYSTALLOGRAPHICA E 62 1820-1822, 2006

Príloha č. 4

Údaje o pedagogickej činnosti pracovníka

Svetozár Balkovic

Technológia špeciálnych anorganických materiálov, počet hodín prednášok celkom: 2,
Katedra keramiky skla a cementu, FCHPT, STU, Bratislava

Mariana Derzsi

Biofyzikálny seminár (1 hodina / týždeň), celkove 1 týždeň, tj. 1 hodina/semester, Katedra
jadrovej fyziky a biofyziky, FMFI UK, Bratislava

Milan Drábik

Nové trendy výskumu v anorganickej a materiálovej chémii, počet hodín prednášok celkom:
20, Katedra anorganickej chémie, PRIF UK, Bratislava

Františka Frajkorová

Cvičenia z anorganickej chémie I.: 36 hod., Ústav anorganickej chémie, technológie
a materiálov, FCHPT, STU, Bratislava

Dušan Galusek

Technológia špeciálnych anorganických materiálov, hostujúce prednášky, 4h, Ústav
anorganickej chémie a technológie FCHPT STU
Fyzikálna chémia skla, hostujúca prednáška, 2h, Katedra materiálového a environmentálneho
inžinierstva, FPT TnU AD

Lubomír Hric

Laboratórium špecializácie 2: 40 hod., Ústav anorganickej chémie, technológie a materiálov,
Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU, Bratislava
Proseminár z chémie: 26 hod., Ústav anorganickej chémie, technológie a materiálov, FCHPT,
STU, Bratislava

Linda Kipsová

Laboratórne cvičenia: 40, Ústav anorganickej chémie, technológie a materiálov, FCHPT,
STU, Bratislava

Stanislav Komorovský

Seminár z počítačového modelovania (5 hodín / týždeň), celkove 1 týždeň, tj. 5
hodín/semester, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, PríFUK, Bratislava

Blanka Kubíková

Laboratórium špecializácie III, 10 hodín týždenne, 130 hodín za semester, Ústav anorganickej
chémie, technológie a materiálov, FCHPT, STU, Bratislava

Marián Kucharík

Laboratórium špecializácie III., 10 hodín týždenne, 130 hodín za semester, Ústav
anorganickej chémie, technológie a materiálov, FCHPT, STU, Bratislava

Zoltán Lenčoš

Konstruktívna keramika, počet hodín prednášok celkom: 24, Ústav anorganickej chémie, technológie a materiálov, FCHPT, STU, Bratislava

Monika Mikoczyová

Laboratórne cvičenia z anorganickej chémie 50 h, Ústav anorganickej chémie a technológie FCHPT, STU, Bratislava

Proseminár anorganická chémia 6 h. Ústav anorganickej chémie a technológie FCHPT STU

Zuzana Netriová

Laboratórne cvičenia z Anorganickej chémie, 5 hodín týždenne, 65 za semester, Ústav anorganickej chémie, technológie a materiálov, FCHPT, STU, Bratislava

Martin Pentrák

Laboratórne cvičenia z korózie a protikoróznej ochrany, 4 hod/týždeň, celkove 6 týždňov, 24 hodín/semester, FCHPT, STU, Bratislava

Pavol Šajgalík

Názov predmetu: Technológia výroby anorganických materiálov – vybrané state, počet hodín prednášok celkom: 22 hod., TU AD

Príloha č. 5

Údaje o medzinárodnej vedeckej spolupráci v 2007

(A) Vyslanie vedeckých pracovníkov do zahraničia na základe dohôd:

Krajina	Druh dohody					
	MAD, KD, VTS		Medziústavná		Ostatné	
	Meno pracovníka	Počet dní	Meno pracovníka	Počet dní	Meno pracovníka	Počet dní
Belgicko					Czímerová	31
					Galusek	3
Česká republika					Smrčok	1
					Scholtzová	1
					Pentrák	6
					Kipsová	3
					Mikoczyová	3
					Chromčíková	1
					Drábik	1
					Galusek	1
					Šajgalík	2
					Lenčes	2
					Liška	3
					Lojanová	7
					Šajgalík	1
					Chromčíková	4
					Čeklovský	5
					Drábik	1
					Liška	5
					Liška	4
					Lojanová	1
					Mikoczyová	1
					Hnatko	1
					Hric	1
					Plachký	1
					Kipsová	1
					Petrušková	1
					Kucharík	1
					Přiščák	1
					Šimko	1
					Liška	2
					Hnatko	1
					Malkin V.	1
					Malkina O.	1
					Liška	3
					Liška	2
					Chromčíková	3

Francúzsko					Šajgalík Kucharík Smrčok Pentrák Boča Šimko	1 6 6 33 8 8
Japonsko					Bujdák Noga Kedžuch Lenčėš Plachký Šajgalík	29 24 65 34 34 10
Maďarsko					Galusek	3
Nemecko					Malkin V. Malkina O. Repiský Smrčok Kucharík Sládkovičová Hric Lojanová Malkin V. Malkina O. Plachký Šajgalík Komorovský Repiský Hrobárik Šajgalík	13 13 14 14 14 7 86 62 31 31 56 3 15 15 31 2
Poľsko	Páľková	13			Árvai	2
Rakúsko					Drábik Bujdák Šajgalík Lenčėš Petrušková	1 26 3 3 3
Rumunsko					Plachký	4
Španielsko					Liška	4
Švajčiarsko					Hrobárik Malkin V.	2 3
Švédsko					Šajgalík	3
Taliansko					Plachký	4
Ukrajina					Galusek	3
Počet vyslaní spolu	1	13			32	837

(B) Prijatie vedeckých pracovníkov zo zahraničia na základe dohôd:

Krajina	Druh dohody					
	MAD, KD, VTS		Medziústavná		Ostatné	
	Meno pracovníka	Počet dní	Meno pracovníka	Počet dní	Meno pracovníka	Počet dní
Česká republika	A. Bláhová	2			I. Dlouhý	1
	T. Grygar	2			V. Šída	2
	L. Vaculíková	5			M. Liška	2
					J. Linhart	2
Japonsko	M.Fukushima	6				
	Kiyoshi Hirao	5				
	You Zhou	11				
Nemecko			Liviu Toma	29	R. Riedel	3
Poľsko	M. Zimowska	5				
Rumunsko					C. Balan	3
Ruská federácia					A. Kozhushko	4
					A. Sinani	4
Ukrajina					L. L. Lytvynov	1
USA					S. Wiederhorn	1
Počet prijatí spolu	7	36	1	29	10	23

(C) Účasť pracovníkov pracoviska na konferenciách v zahraničí (nezahrnutých v "A"):

Krajina	Názov konferencie	Meno pracovníka	Počet dní
Anglicko	3 rd Annual workshop of the IP FUNMIG	Malkin V.	5
Česká republika	Nanomateriály na bázi interkalatu a povrchově modifikovaných struktur	Bujdák	2
		Čeklovský	2
	XI. Konferencia: „Ekologie a nové stavební hmoty a výrobky”	Balkovic	3
	15 th European symposium on fluorine chemistry	Kucharík	6
		Šimko	6
		Korenko	6
		Boča	6
		Kubíková	6
		Ivanová	6
	Kalorimetrický seminár	Chromčíková	5
	Seminár o termickej analýze	Chromčíková	2
	VI. Odborná konferencia: „MALTOVINY”	Drábik	1
		Balkovic	1
	Výročná konferencia Českej sklárskej spoločnosti	Liška	2
Fínsko	Winter school in theoretical chemistry 2007	Hrobárik	9
		Repiský	9
Francúzsko	Relativistic effects in heavy elements – REHE	Malkin V.	5
		Repiský	5
		Hrobárik	5
		Komorovský	5
		Malkina O.	5
	International workshop on dynamics of molecules and materials	Smrčok	5
		Sládkovičová	5
	Workshop materials euroroads	Šajgalík	2
	20 th International conference on molecular energy transfer	Bujdák	6
India	XXI st International congress on glass ICG 2007	Galusek	6
	Summer school of calorimetry	Ivanová	8
	8 th demon developers' workshop	Malkin V.	5
		Malkina O.	5
India	2 nd International conference on recent advances in composite materials	Galusek	6
Japonsko	Molecular theory for real systems	Noga	3
	2 nd International symposium on SiAlON and Non - Oxides	Šajgalík	3
Kanada	12. Medzinárodný kongres o chémii cementu: ”ICCC 2007,,	Drábik	9
Maroko	4 th European crystallography meeting. ECM-24”	Smrčok	6
		Scholtzová	6
		Sládkovičová	6
Rakúsko	6 th Central European symposium on theoretical chemistry. CESTC 2007	Kedžuch	4
		Varga	4

Nemecko	Highly accurate calculations of molecular electronic structure	Noga	3
	10 th International conference and exhibition of the european ceramic society	Šajgalík	4
		Lenčéš	5
		Lojanová	5
	3 rd FUNMIG RTDC-2 Progress meeting	Malkin V.	2
	5 th Ligh weight armour group	Galusek	3
Poľsko	Symposium on advanced methods of quantum chemistry and physics	Kedžuch	5
		Noga	5
	11 th International conference on chemistry and environment	Hrobárik	7
	Konferencia Poľskej keramickej spoločnosti	Galusek	4
Portugalsko	EUROCLAY 2007	Komadel	7
		Andrejkovičová	7
		Hrachová	7
		Madejová	7
		Pálková	7
		Pentrák	7
		Valúchová	7
		Bujdák	6
		Czímerová	7
		Čeklovský	7
Rumunsko	Meeting PolyCerNet	Šajgalík	6
		Plachký	6
Srbsko	7 th Student's meeting	Mikoczyová	4
		Hric	4
		Lojanová	4
		Kipsová	4
Taiwan	International symposium on advanced ceramics and technology for sustainable energy applications. ACTSEA 2007	Šajgalík	5
Ukrajina	Modern physical chemistry for advanced materials	Čeklovský	6
USA	Materials research society fall meeting 2007	Lenčéš	9
		Šajgalík	9
Veľká Británia	Workshop: „Fundamentals of body armour”	Galusek	3

Vysvetlivky:

MAD - medziakademické dohody, KD - kultúrne dohody, VTS - vedecko-technická spolupráca v rámci vládnych dohôd